(19) 대한민국특허청(KR)
(12) 공개특허공보(A)

(11) 공개번호 10-2022-0062819
(43) 공개일자 2022년05월17일

(51) 국제특허분류(Int. Cl.)
C07F 5/02 (2006.01) *C09K 11/06* (2006.01)
H01L 51/00 (2006.01) *H01L 51/50* (2006.01)
(52) CPC특허분류
C07F 5/027 (2013.01)
C09K 11/06 (2022.01)
(21) 출원번호 10-2020-0148459
(22) 출원일자 2020년11월09일
심사청구일자 2020년11월09일

(71) 출원인
경희대학교 산학협력단
경기도 용인시 기흥구 덕영대로 1732 (서천동, 경희대학교 국제캠퍼스내)
(72) 발명자
권장혁
경기도 성남시 수정구 위례순환로 100, 3306동 203호(창곡동, 위례자이)
이주영
경기도 수원시 팔달구 일월로18번길 4-26, 172동 1604호(화서동, 꽃뫼버들마을 코오롱아파트)
(뒷면에 계속)
(74) 대리인
특허법인 하나

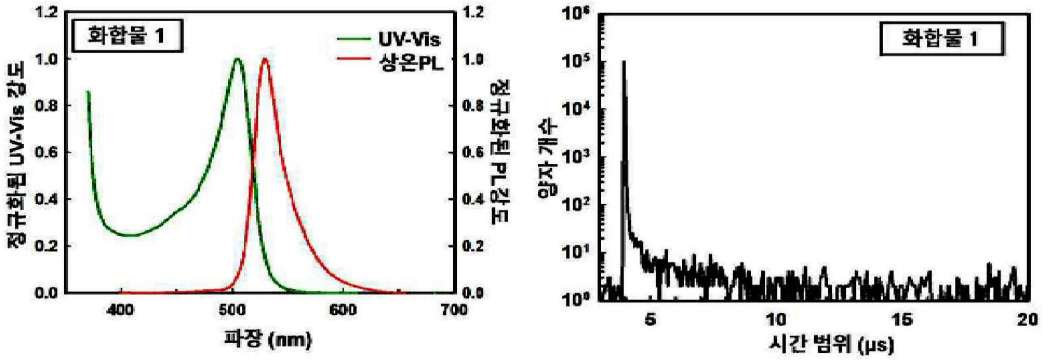
전체 청구항 수 : 총 9 항

(54) 발명의 명칭 **보론 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자**

(57) 요 약

본 명세서는 화학식 1로 표시되는 보론 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것으로, 종래의 지연 형광 물질 대비 좁은 반치폭을 갖는 발광 스펙트럼과 우수한 내부 양자 효율을 가져 고색순도 및 고효율 특성을 가진다.

대 표 도 - 도1



(52) CPC특허분류
H01L 51/008 (2013.01)
H01L 51/5024 (2013.01)
H01L 51/5056 (2013.01)
H01L 51/5072 (2013.01)
C09K 2211/188 (2013.01)
(72) 발명자
켄케라 라야파 나빈
서울특별시 동대문구 이문로19길 10-6, B104호(이문동)
라마나스칸다 브라벤트
서울특별시 동대문구 천장산로9길 48-3, 601호(이문동, 이문동다세대주택)
황순재
서울특별시 동대문구 이문로19길 4-7, 105호(이문동)

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1415167747
과제번호	20006464
부처명	산업통상자원부
과제관리(전문)기관명	한국산업기술평가관리원
연구사업명	소재부품산업미래성장동력(R&D)
연구과제명	지연형광 감광형 BT 2020향 고색순도 및 고효율의 RGB 발광층 소재 개발
기 여 율	1/2
과제수행기관명	경희대학교 산학협력단
연구기간	2019.07.01 ~ 2023.12.31

이 발명을 지원한 국가연구개발사업

과제고유번호	1711116330
과제번호	2019M3D1A2104019
부처명	과학기술정보통신부
과제관리(전문)기관명	한국연구재단
연구사업명	미래소재디스커버리지원(R&D)
연구과제명	신규 분자 구조 기반의 고효율 장수명 청색 발광 소재 연구
기 여 율	1/2
과제수행기관명	경희대학교 산학협력단
연구기간	2019.09.27 ~ 2022.12.31

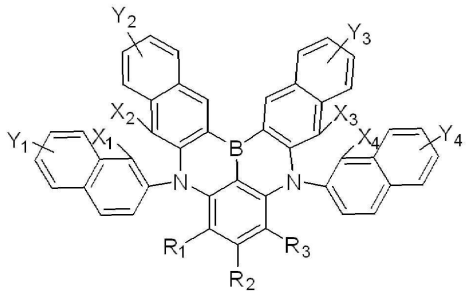
명 세 서

청구범위

청구항 1

하기 화학식 1로 표시되는, 보론 화합물:

[화학식 1]



상기 화학식 1에서,

Y_1 내지 Y_4는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 니트릴기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환, 또는 비치환된 실릴기, 치환, 또는 비치환된 아민기, 치환, 또는 비치환된 아릴기, 치환, 또는 비치환된 헤테로아릴기, 치환, 또는 비치환된 디아릴아미노기, 치환, 또는 비치환된 디헤테로아릴아미노기, 또는 치환, 또는 비치환된 아릴헤테로아릴아미노기이고,

X_1 내지 X_4는 각각 독립적으로 수소이거나, 상호 결합하여 고리를 형성하고,

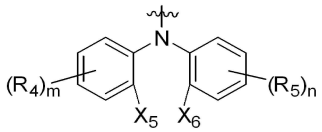
R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 니트릴기, 할로겐기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 디아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 디헤테로아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 아릴헤테로아릴아미노기이거나, R_1과 R_2 또는 R_2와 R_3가 상호 결합하여 형성한 고리 구조이다.

청구항 2

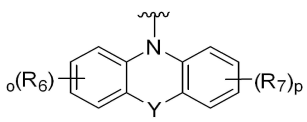
제1항에 있어서,

R_1 내지 R_3 중 적어도 하나는 하기 화학식 2 내지 3 중 어느 하나로 표시되는, 보론 화합물:

[화학식 2]



[화학식 3]



상기 화학식 2 또는 3에서,

X_5 내지 X_6은 각각 독립적으로 수소이거나, 상호 결합하여 고리를 형성하고,

R_4 내지 R_7은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 니트릴기, 할로겐기, 치환 또는 비치환된 방향족 고리, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 디아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 디헤테로아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 아릴헤테로아릴아미노기이고,

Y는 황, 산소, 하나 이상의 알킬기 또는 아릴기가 연결된 탄소이고,

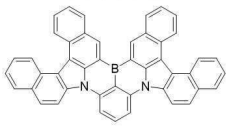
m, n, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.

청구항 3

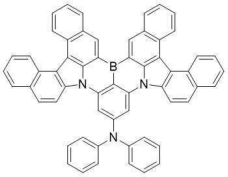
제1항에 있어서,

하기 화학식 1-1~1-132 중 어느 하나로 표시되는, 보론 화합물:

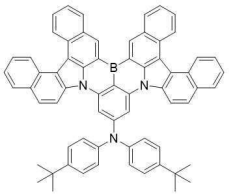
[화학식 1-1]



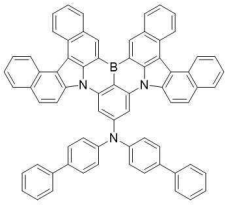
[화학식 1-2]



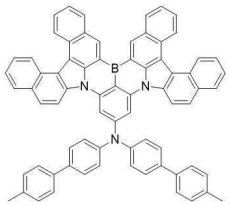
[화학식 1-3]



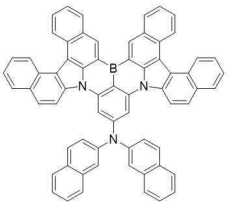
[화학식 1-4]



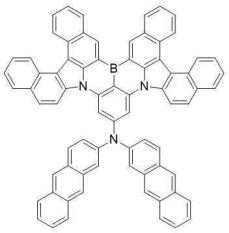
[화학식 1-5]



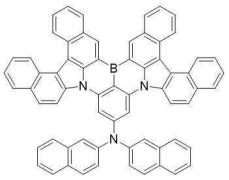
[화학식 1-6]



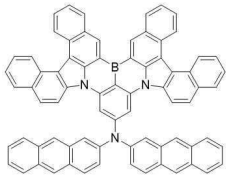
[화학식 1-7]



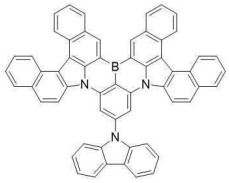
[화학식 1-8]



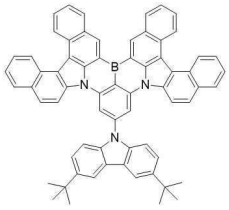
[화학식 1-9]



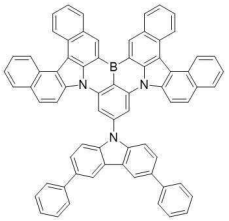
[화학식 1-10]



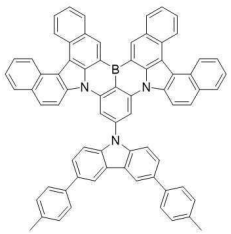
[화학식 1-11]



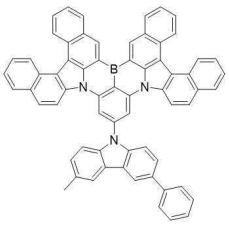
[화학식 1-12]



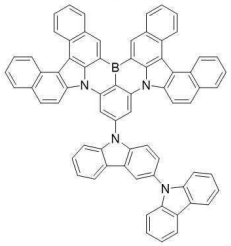
[화학식 1-13]



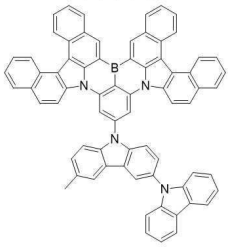
[화학식 1-14]



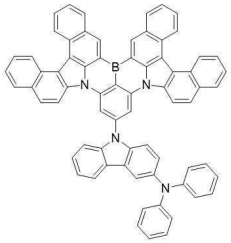
[화학식 1-15]



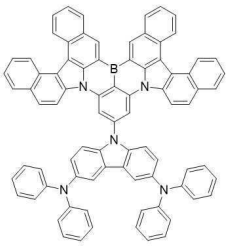
[화학식 1-16]



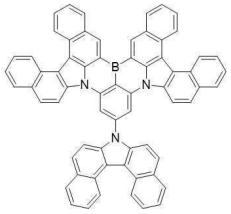
[화학식 1-17]



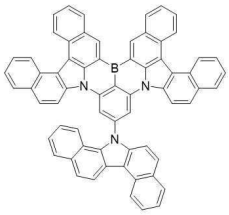
[화학식 1-18]



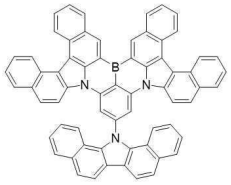
[화학식 1-19]



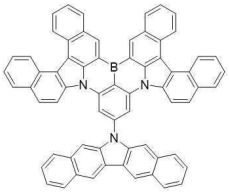
[화학식 1-20]



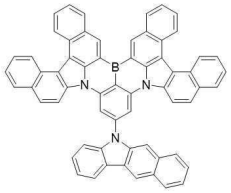
[화학식 1-21]



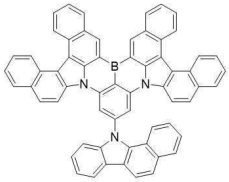
[화학식 1-22]



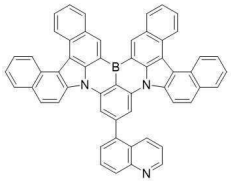
[화학식 1-23]



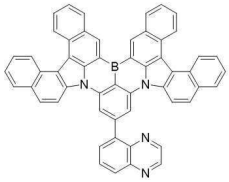
[화학식 1-24]



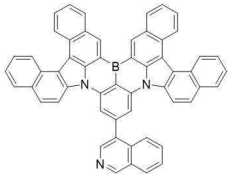
[화학식 1-25]



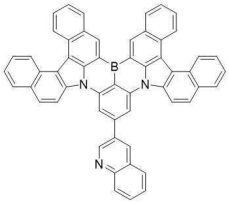
[화학식 1-26]



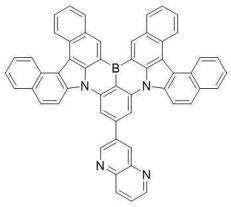
[화학식 1-27]



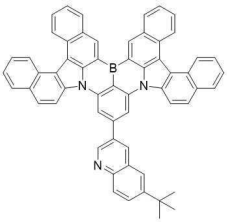
[화학식 1-28]



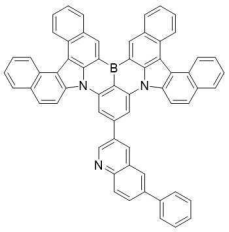
[화학식 1-29]



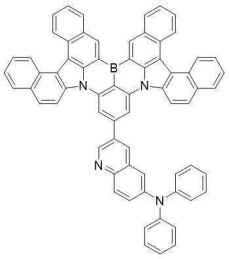
[화학식 1-30]



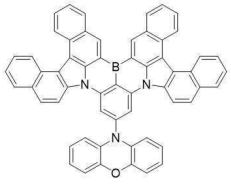
[화학식 1-31]



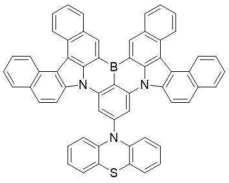
[화학식 1-32]



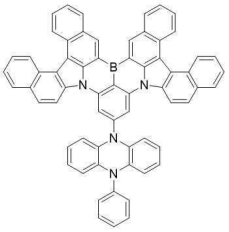
[화학식 1-33]



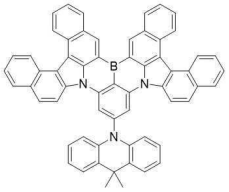
[화학식 1-34]



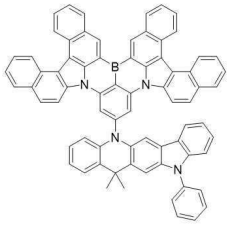
[화학식 1-35]



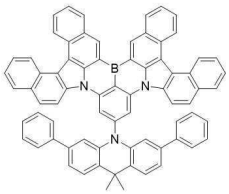
[화학식 1-36]



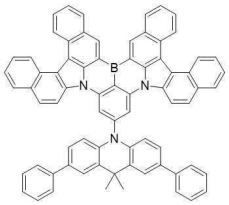
[화학식 1-37]



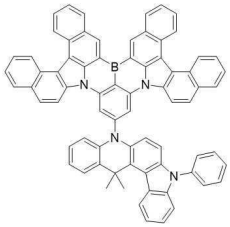
[화학식 1-38]



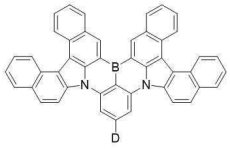
[화학식 1-39]



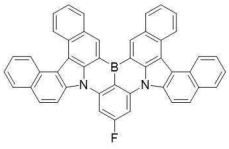
[화학식 1-40]



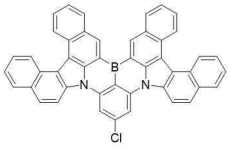
[화학식 1-41]



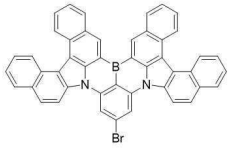
[화학식 1-42]



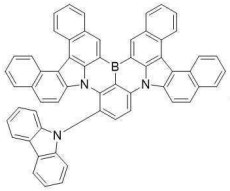
[화학식 1-43]



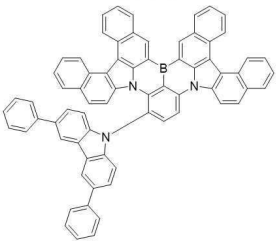
[화학식 1-44]



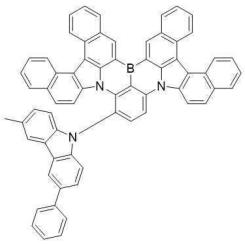
[화학식 1-45]



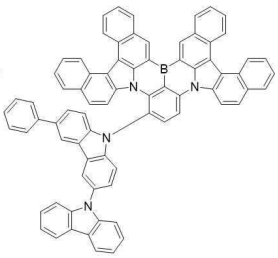
[화학식 1-46]



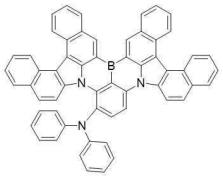
[화학식 1-47]



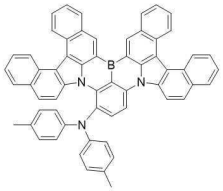
[화학식 1-48]



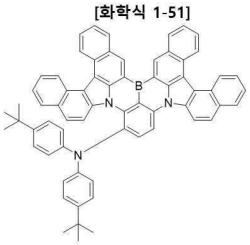
[화학식 1-49]



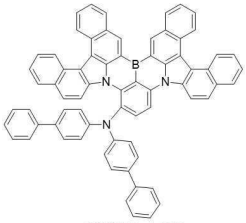
[화학식 1-50]



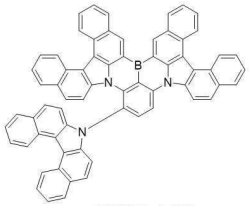
[화학식 1-51]



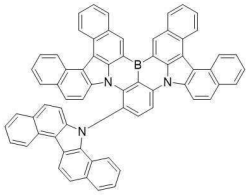
[화학식 1-52]



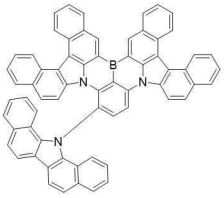
[화학식 1-53]



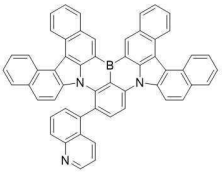
[화학식 1-54]



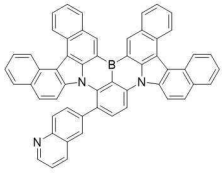
[화학식 1-55]



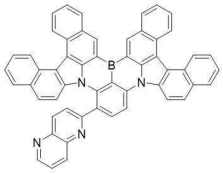
[화학식 1-56]



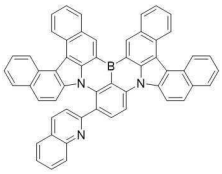
[화학식 1-57]



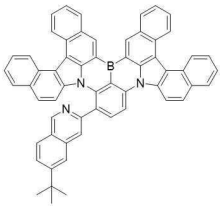
[화학식 1-58]



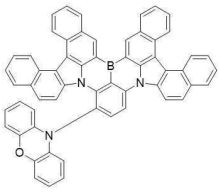
[화학식 1-59]



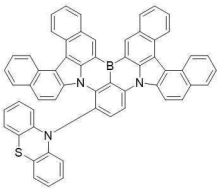
[화학식 1-60]



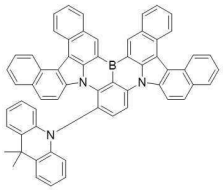
[화학식 1-61]



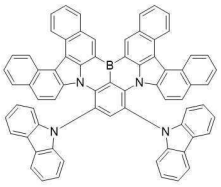
[화학식 1-62]



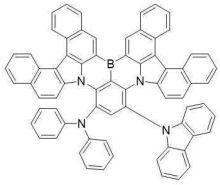
[화학식 1-63]



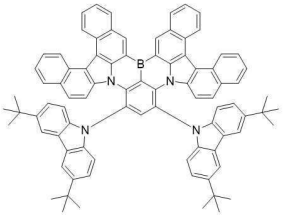
[화학식 1-64]



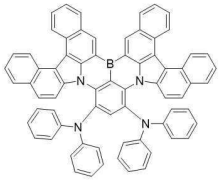
[화학식 1-65]



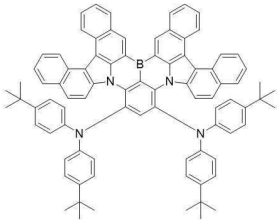
[화학식 1-66]



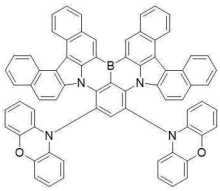
[화학식 1-67]



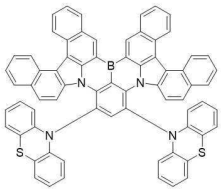
[화학식 1-68]



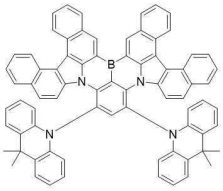
[화학식 1-69]



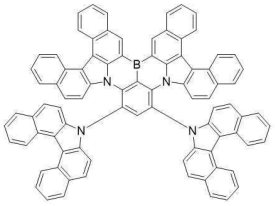
[화학식 1-70]



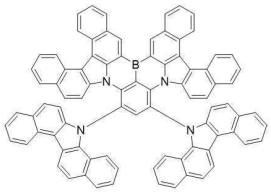
[화학식 1-71]



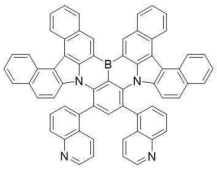
[화학식 1-72]



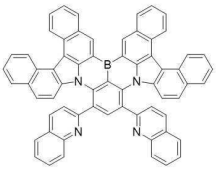
[화학식 1-73]



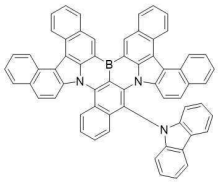
[화학식 1-74]



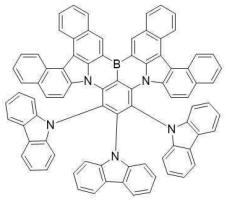
[화학식 1-75]



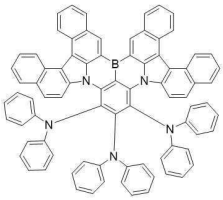
[화학식 1-76]



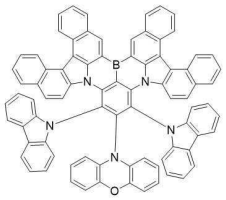
[화학식 1-77]



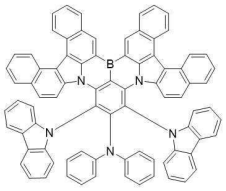
[화학식 1-78]



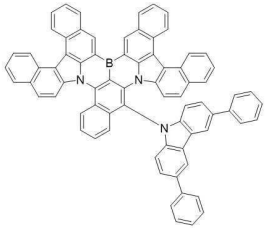
[화학식 1-79]



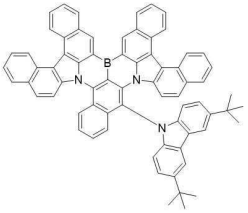
[화학식 1-80]



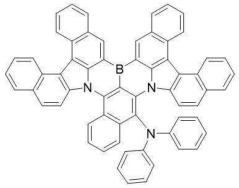
[화학식 1-81]



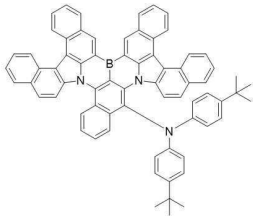
[화학식 1-82]



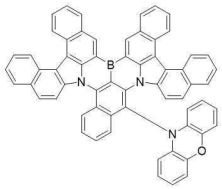
[화학식 1-83]



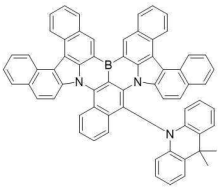
[화학식 1-84]



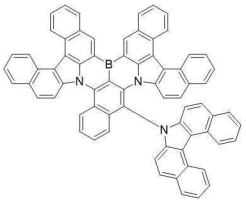
[화학식 1-85]



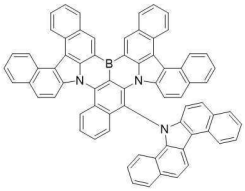
[화학식 1-86]



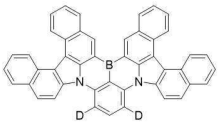
[화학식 1-87]



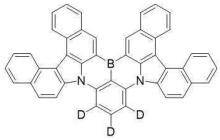
[화학식 1-88]



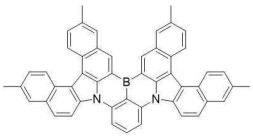
[화학식 1-89]



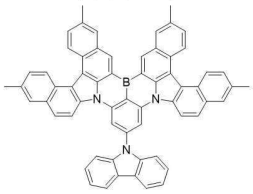
[화학식 1-90]



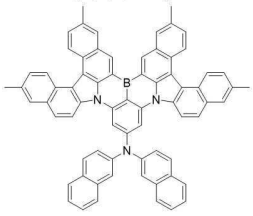
[화학식 1-91]



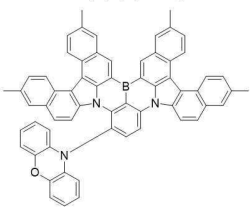
[화학식 1-92]



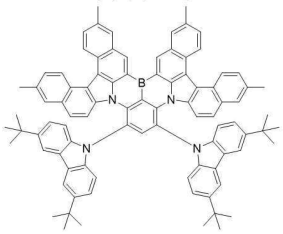
[화학식 1-93]



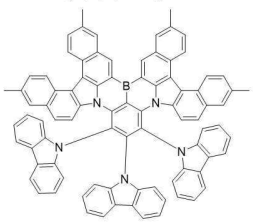
[화학식 1-94]



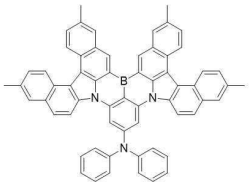
[화학식 1-95]



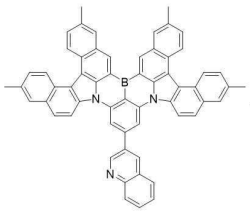
[화학식 1-96]



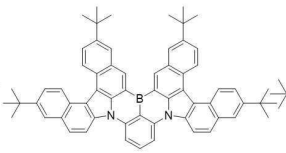
[화학식 1-97]



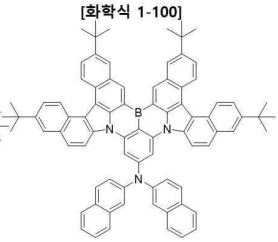
[화학식 1-98]



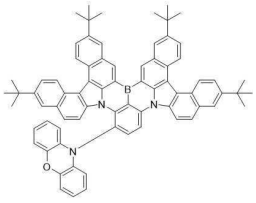
[화학식 1-99]



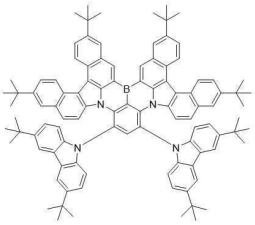
[화학식 1-100]



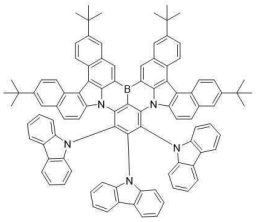
[화학식 1-101]



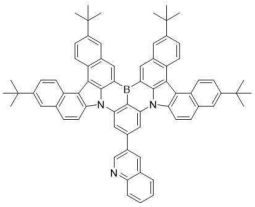
[화학식 1-102]



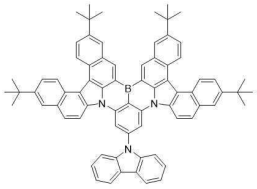
[화학식 1-103]



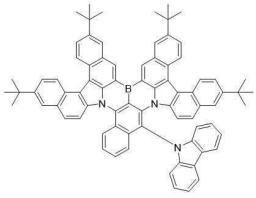
[화학식 1-104]



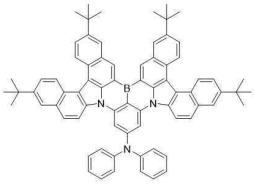
[화학식 1-105]



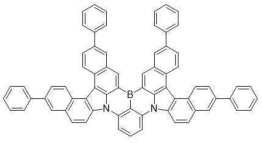
[화학식 1-106]



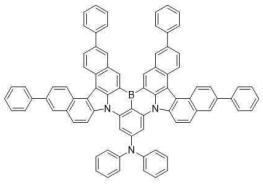
[화학식 1-107]



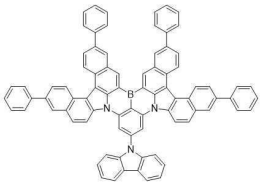
[화학식 1-108]



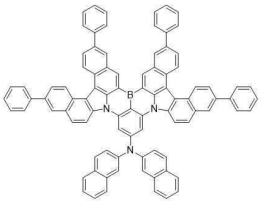
[화학식 1-109]



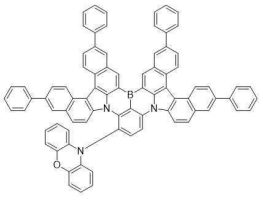
[화학식 1-110]



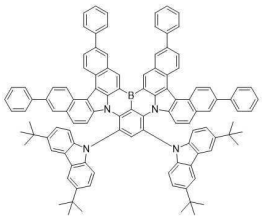
[화학식 1-111]



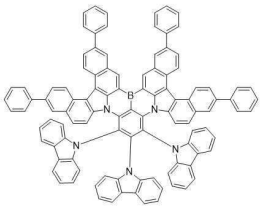
[화학식 1-112]



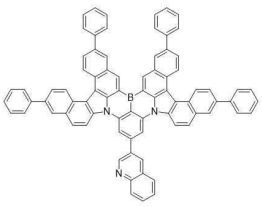
[화학식 1-113]



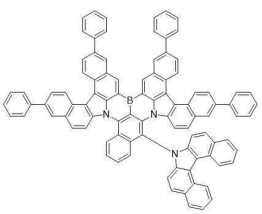
[화학식 1-114]



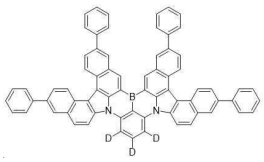
[화학식 1-115]



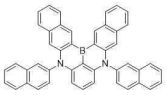
[화학식 1-116]



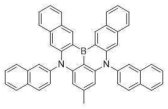
[화학식 1-117]



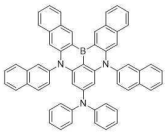
[화학식 1-118]



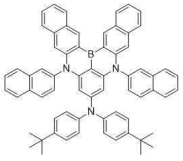
[화학식 1-119]



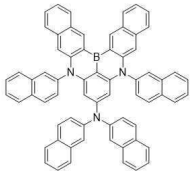
[화학식 1-120]



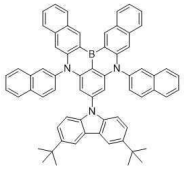
[화학식 1-121]



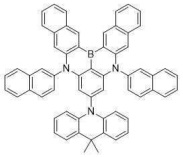
[화학식 1-122]



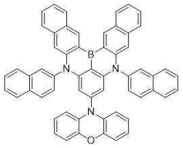
[화학식 1-123]



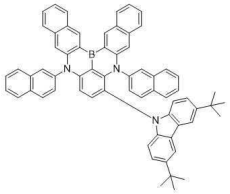
[화학식 1-124]



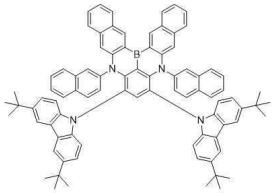
[화학식 1-125]



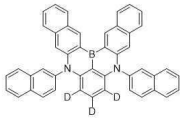
[화학식 1-126]



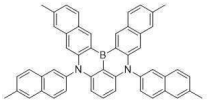
[화학식 1-127]



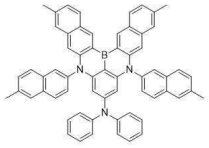
[화학식 1-128]



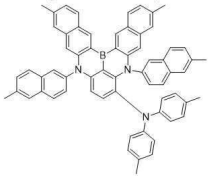
[화학식 1-129]



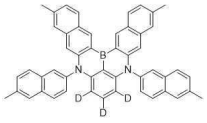
[화학식 1-130]



[화학식 1-131]



[화학식 1-132]



청구항 4

제1항에 있어서,

발광 스펙트럼이 450~600 nm에서 피크를 가지는, 보론 화합물.

청구항 5

제1항에 있어서,

발광 스펙트럼의 반치폭이 40 nm 이하인, 보론 화합물.

청구항 6

제1항에 있어서,

광발광양자수율이 0.90 이상인, 보론 화합물.

청구항 7

제1 전극;

상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및

상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 개재된 1층 이상의 유기물층;을 포함하고,

상기 유기물층 중 1층 이상은 제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 따른 보론 화합물을 1종 이상 포함하는, 유기 발광 소자.

청구항 8

제7항에 있어서,

상기 제1 전극은 애노드이고, 상기 제2 전극은 캐소드이고,

상기 유기물층은,

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 따른 보론 화합물을 1종 이상 포함하는 발광층;

상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재되고, 정공주입층, 정공수송층 및 전자저지층 중 적어도 하나를 포함한 정공수송영역; 및

상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나를 포함하는 전자수송영역;을 포함하는, 유기 발광 소자.

청구항 9

제7항에 있어서,

상기 유기물 층은,

1종 이상의 호스트 화합물;

지연 형광 화합물 또는 인광 화합물; 및

제1항 내지 제6항 중 어느 한 항에 따른 보론 화합물을 1종 이상 포함하는 발광층을 포함하는, 유기 발광 소자.

발명의 설명

기 술 분 야

[0001] 본 발명은 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것으로, 더욱 상세하게는 색특성이 우수한 화합물 또는 열 활성 지연 형광(Thermally Activated Delayed Fluorescence; TADF) 특성을 나타내면서 색특성이 우수한 화합물 및 이를 포함하는 유기 발광 소자에 관한 것이다.

배 경 기 술

[0002] 유기 발광이란 유기 물질을 이용하여 전기 에너지를 빛 에너지로 변환시키는 현상을 말한다. 유기 발광 소자(Organic Light Emitting Device; OLED)는 이러한 유기 발광을 이용하여 애노드(Anode)와 캐소드(Cathode)의 중간에 유기 물질을 개재하여 제조한 것으로, 전기 에너지를 가하면 빛을 발하는 특성이 있다. 유기 발광 소자는 효율과 안정성 향상을 위해 다층의 유기층을 포함하며, 일반적으로 정공주입층(Hole Injection Layer; HIL), 정공수송층(Hole Transfer Layer; HTL), 발광층, 전자수송층(Electron Transfer Layer; ETL), 및 전자주입층(Electron Injection Layer; EIL) 등으로 이루어질 수 있다.

[0003] 유기층으로 사용되는 재료는 기능에 따라 발광 재료 및 전하 수송재료로 분류할 수 있으며, 상기 발광 재료는 발광 메커니즘에 따라 전자의 단일항 여기상태(Singlet exited state)로부터 유래되는 형광(Fluorescence) 현상을 이용하는 형광 재료와, 삼중항 여기상태(Triplet exited state)로부터 유래되는 인광(Phosphorescence) 현상을 이용하는 인광 재료로 분류될 수 있다. 또한, 발광 재료는 발광색에 따라 청색, 녹색, 적색 발광 재료로 나누어질 수 있으며, 청색을 제외한 나머지 색상은 인광 재료가 개발되어 산업계에서 사용하고 있다. 그러나, 청색 재료의 경우 수명 및 색특성의 한계로 인해 형광 재료만을 사용 중으로, 이리듐 혹은 백금과 같은 중금속

을 이용해 삼중항을 이용하는 청색 인광 재료 및 단일항과 삼중항 에너지 차이를 작게 만들어 순수 유기재료로만 삼중항을 이용하는 지연 형광 재료 등이 개발 중이다. 다만, 중금속을 이용하는 인광 물질을 사용하는 경우 높은 효율을 달성할 수 있으나, 인광을 구현하기 위한 중금속으로 인해 금속과 유기물 사이의 전하 이동(charge transfer) 발광을 하고 반치폭이 넓은 한계가 있다.

[0004] 따라서 반치폭 특성이 좁은 재료에 대한 관심이 증가하고 있으며, 청색, 녹색, 황색, 주황색, 적색 등 다양한 색영역에 대해서도 연구가 진행 중이다.

발명의 내용

해결하려는 과제

[0005] 본 발명은 전술한 종래 기술의 문제점을 해결하기 위한 것으로, 본 발명의 일 목적은 색순도가 우수한 화합물을 제공하는 것이다.

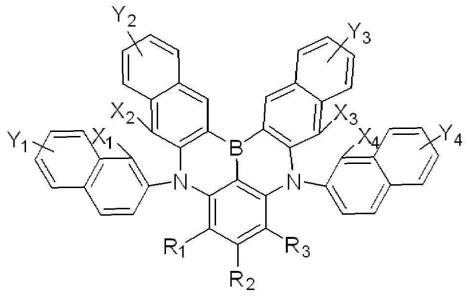
[0006] 본 발명의 다른 일 목적은 색순도가 우수한 화합물을 포함하는 유기 발광 소자를 제공하는 것이다.

[0007] 또한, 본 발명의 다른 일 목적은 고효율을 나타내면서도 색순도가 우수한 화합물을 이용하여 지연 형광 또는 인광 감광형 초형광 소자를 제공하는 것이다.

과제의 해결 수단

[0008] 본 발명의 일 측면은 하기 화학식 1로 표시되는 보론 화합물을 제공한다.

[0009] [화학식 1]

[0010] 

[0011] 상기 화학식 1에서,

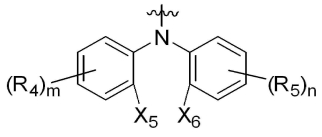
[0012] Y_1 내지 Y_4는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 니트릴기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환, 또는 비치환된 실릴기, 치환, 또는 비치환된 아민기, 치환, 또는 비치환된 아릴기, 치환, 또는 비치환된 헤테로아릴기, 치환, 또는 비치환된 디아릴아미노기, 치환, 또는 비치환된 디헤테로아릴아미노기, 또는 치환, 또는 비치환된 아릴헤테로아릴아미노기이고,

[0013] X_1 내지 X_4는 각각 독립적으로 수소이거나, 상호 결합하여 고리를 형성하고,

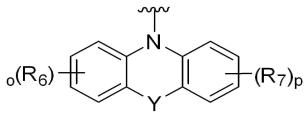
[0014] R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 니트릴기, 할로겐기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 디아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 디헤테로아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 아릴헤테로아릴아미노기이거나, R_1과 R_2 또는 R_2와 R_3가 상호 결합하여 형성한 고리 구조이다.

[0015] 일 실시예에 있어서, R_1 내지 R_3 중 적어도 하나는 하기 화학식 2 내지 3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0016] [화학식 2]

[0017] 

[0018] [화학식 3]



[0019]

[0020] 상기 화학식 2 또는 3에서,

[0021] X_5 내지 X_6은 각각 독립적으로 수소이거나, 상호 결합하여 고리를 형성하고,

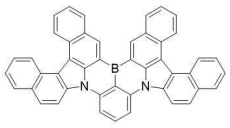
[0022] R_4 내지 R_7은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 니트릴기, 할로겐기, 치환 또는 비치환된 방향족 고리, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 디아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 디헤테로아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 아릴헤테로아릴아미노기이고,

[0023] Y는 황, 산소, 하나 이상의 알킬기 또는 아릴기가 연결된 탄소이고,

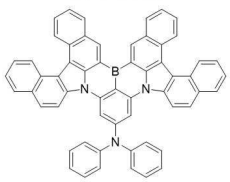
[0024] m, n, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.

[0025] 일 실시예에 있어서, 상기 화합물은 하기 화학식 1-1~1-132 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

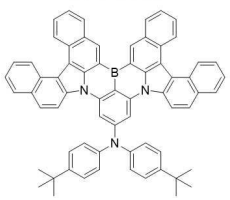
[화학식 1-1]



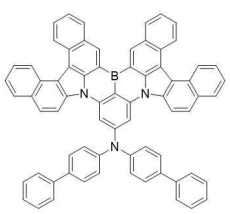
[화학식 1-2]



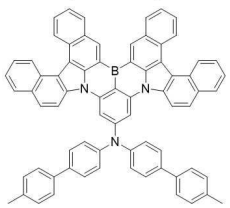
[화학식 1-3]



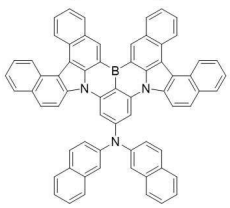
[화학식 1-4]



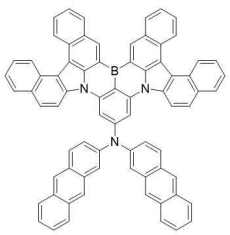
[화학식 1-5]



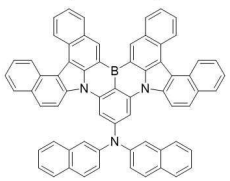
[화학식 1-6]



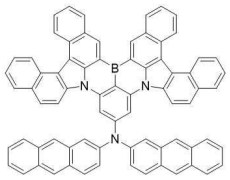
[화학식 1-7]



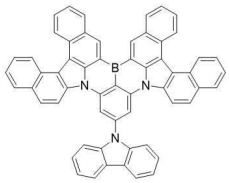
[화학식 1-8]



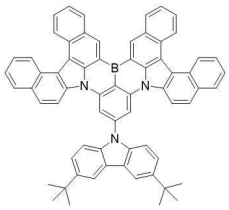
[화학식 1-9]



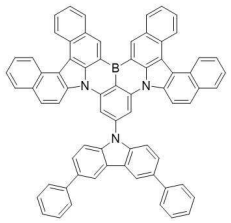
[화학식 1-10]



[화학식 1-11]

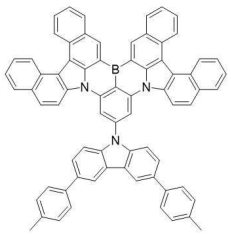


[화학식 1-12]

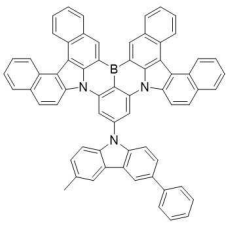


[0026]

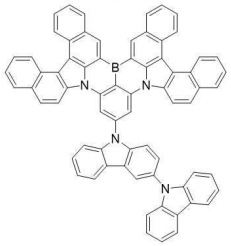
[화학식 1-13]



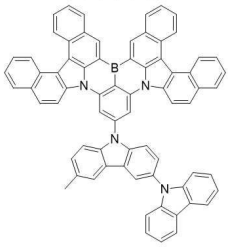
[화학식 1-14]



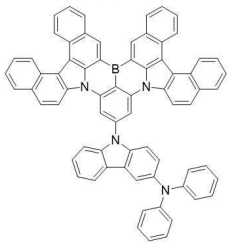
[화학식 1-15]



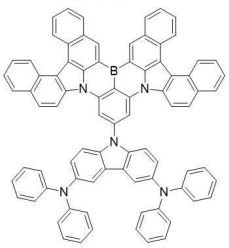
[화학식 1-16]



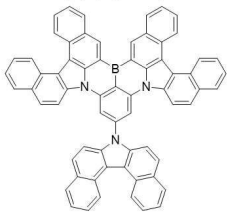
[화학식 1-17]



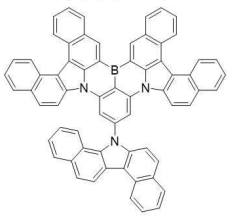
[화학식 1-18]



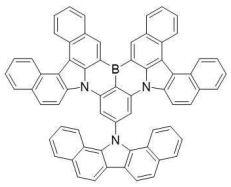
[화학식 1-19]



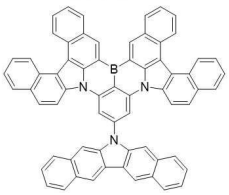
[화학식 1-20]



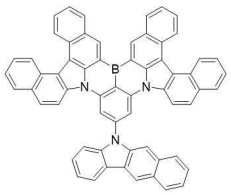
[화학식 1-21]



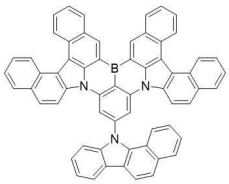
[화학식 1-22]



[화학식 1-23]

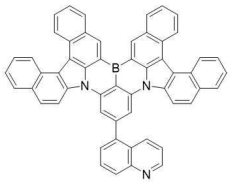


[화학식 1-24]

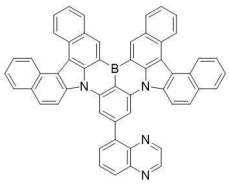


[0027]

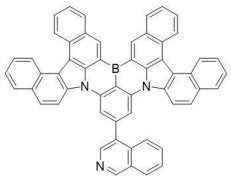
[화학식 1-25]



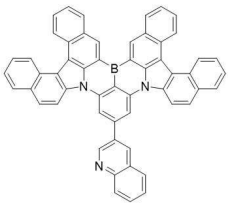
[화학식 1-26]



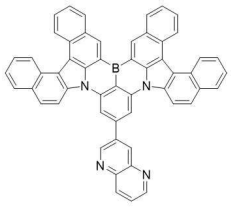
[화학식 1-27]



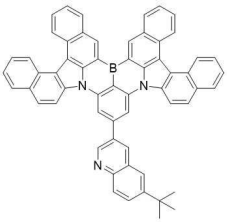
[화학식 1-28]



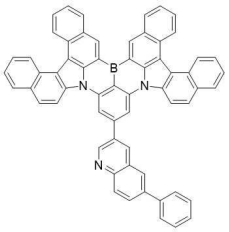
[화학식 1-29]



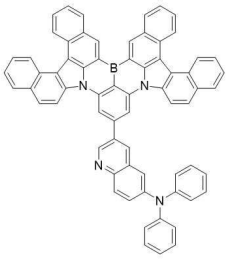
[화학식 1-30]



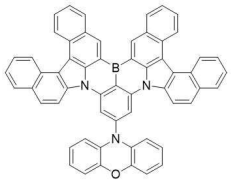
[화학식 1-31]



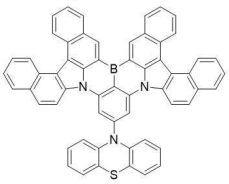
[화학식 1-32]



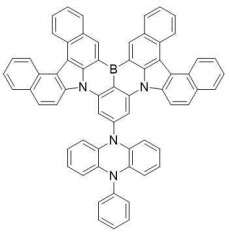
[화학식 1-33]



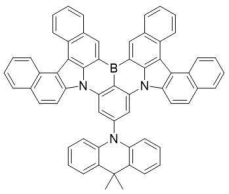
[화학식 1-34]



[화학식 1-35]

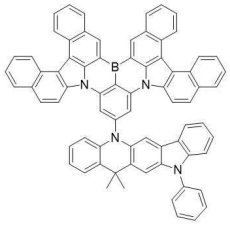


[화학식 1-36]

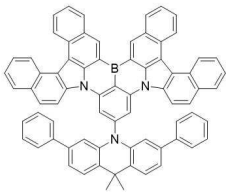


[0028]

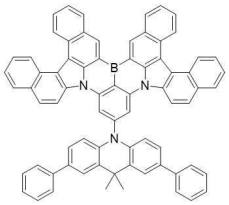
[화학식 1-37]



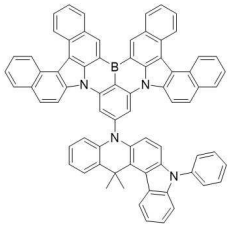
[화학식 1-38]



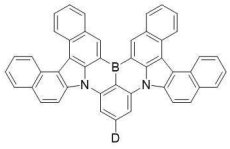
[화학식 1-39]



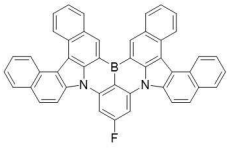
[화학식 1-40]



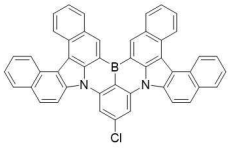
[화학식 1-41]



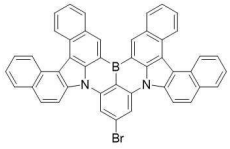
[화학식 1-42]



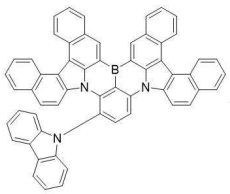
[화학식 1-43]



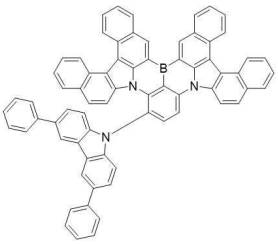
[화학식 1-44]



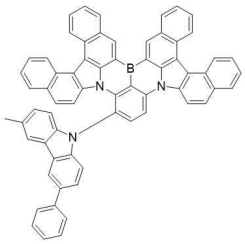
[화학식 1-45]



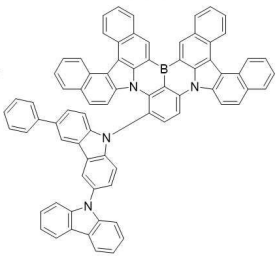
[화학식 1-46]



[화학식 1-47]

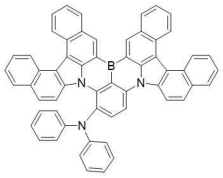


[화학식 1-48]

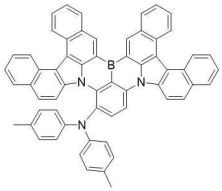


[0029]

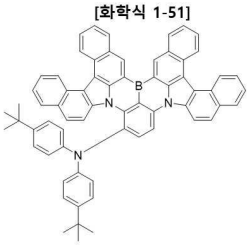
[화학식 1-49]



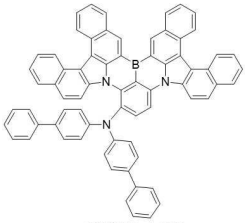
[화학식 1-50]



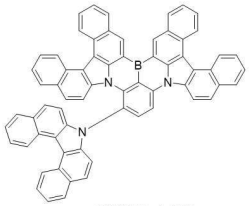
[화학식 1-51]



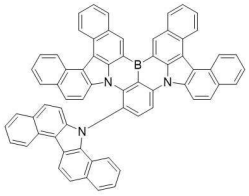
[화학식 1-52]



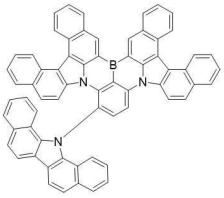
[화학식 1-53]



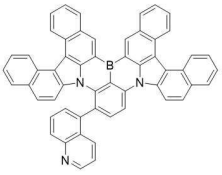
[화학식 1-54]



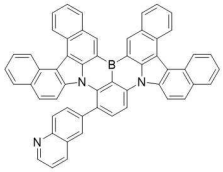
[화학식 1-55]



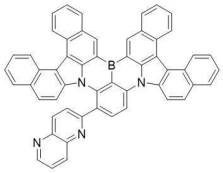
[화학식 1-56]



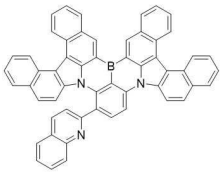
[화학식 1-57]



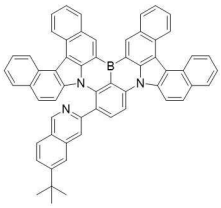
[화학식 1-58]



[화학식 1-59]

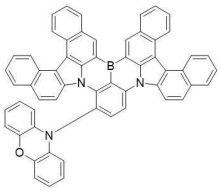


[화학식 1-60]

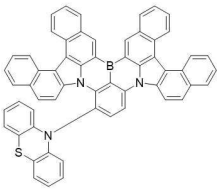


[0030]

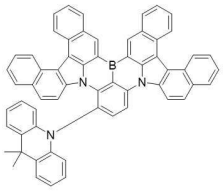
[화학식 1-61]



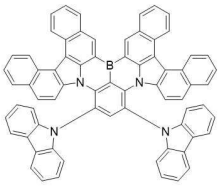
[화학식 1-62]



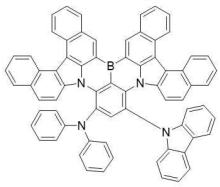
[화학식 1-63]



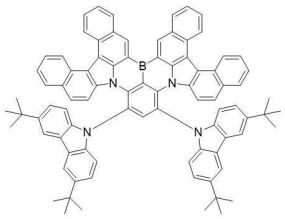
[화학식 1-64]



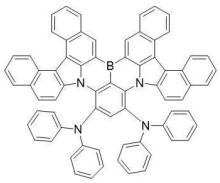
[화학식 1-65]



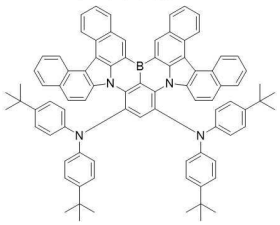
[화학식 1-66]



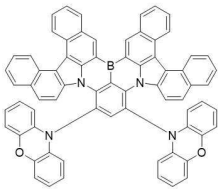
[화학식 1-67]



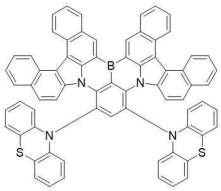
[화학식 1-68]



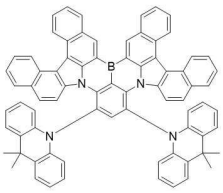
[화학식 1-69]



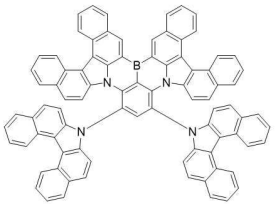
[화학식 1-70]



[화학식 1-71]

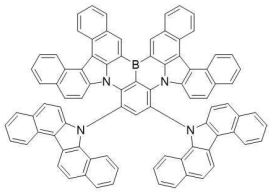


[화학식 1-72]

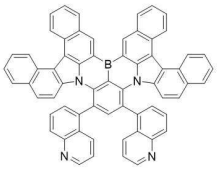


[0031]

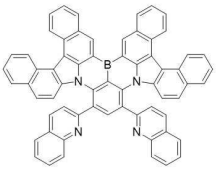
[화학식 1-73]



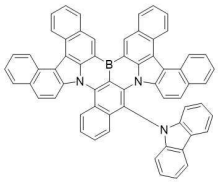
[화학식 1-74]



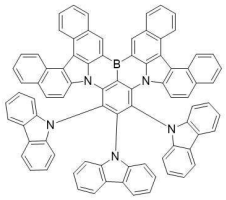
[화학식 1-75]



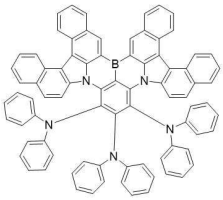
[화학식 1-76]



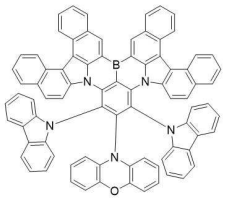
[화학식 1-77]



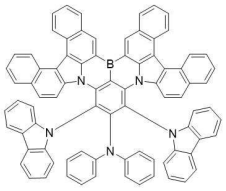
[화학식 1-78]



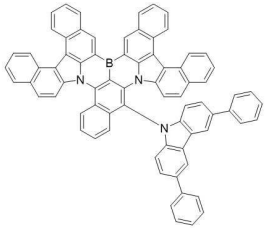
[화학식 1-79]



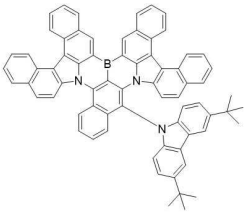
[화학식 1-80]



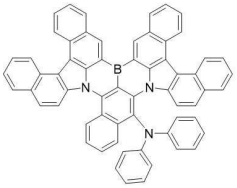
[화학식 1-81]



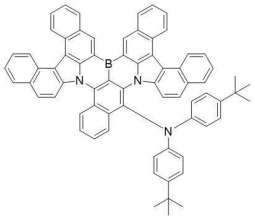
[화학식 1-82]



[화학식 1-83]

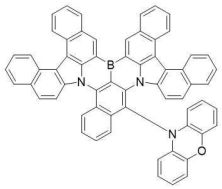


[화학식 1-84]

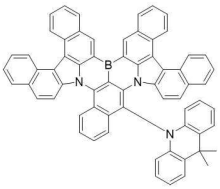


[0032]

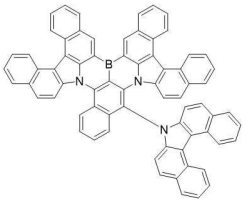
[화학식 1-85]



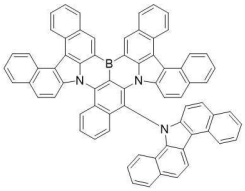
[화학식 1-86]



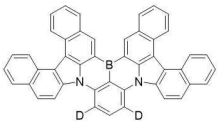
[화학식 1-87]



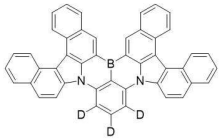
[화학식 1-88]



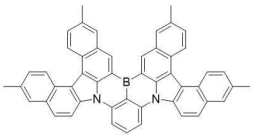
[화학식 1-89]



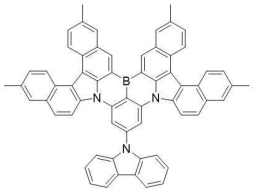
[화학식 1-90]



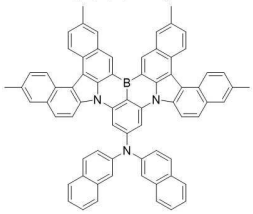
[화학식 1-91]



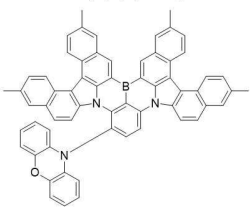
[화학식 1-92]



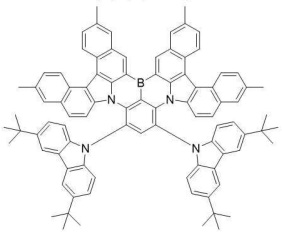
[화학식 1-93]



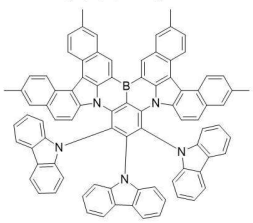
[화학식 1-94]



[화학식 1-95]

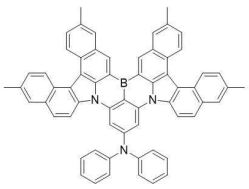


[화학식 1-96]

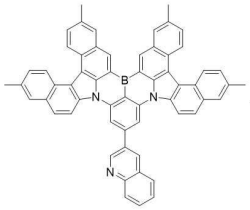


[0033]

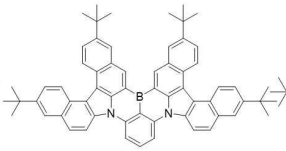
[화학식 1-97]



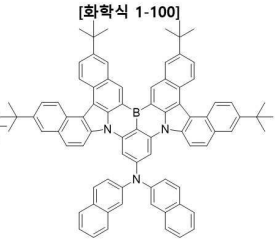
[화학식 1-98]



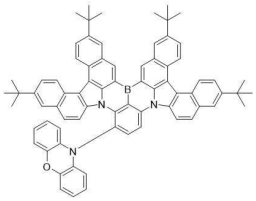
[화학식 1-99]



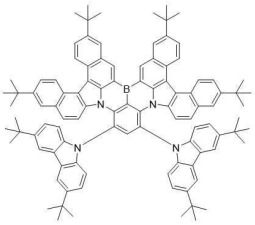
[화학식 1-100]



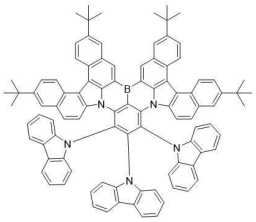
[화학식 1-101]



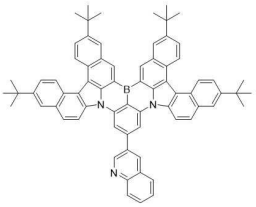
[화학식 1-102]



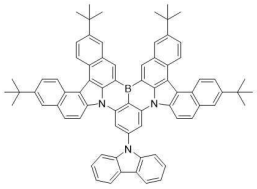
[화학식 1-103]



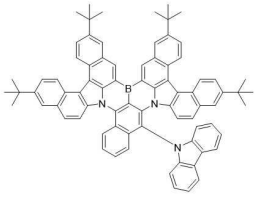
[화학식 1-104]



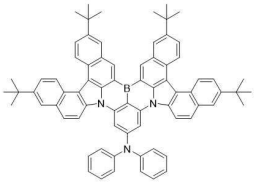
[화학식 1-105]



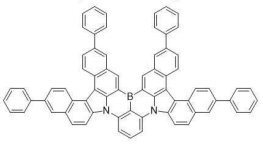
[화학식 1-106]



[화학식 1-107]

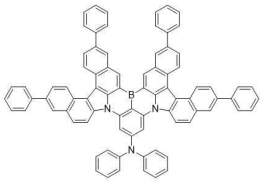


[화학식 1-108]

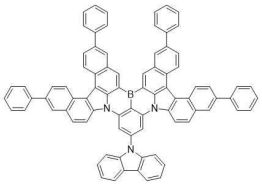


[0034]

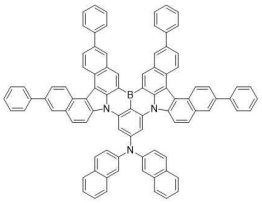
[화학식 1-109]



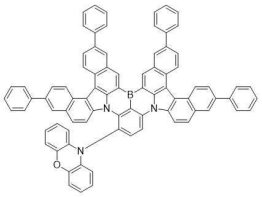
[화학식 1-110]



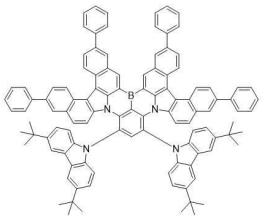
[화학식 1-111]



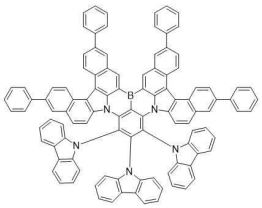
[화학식 1-112]



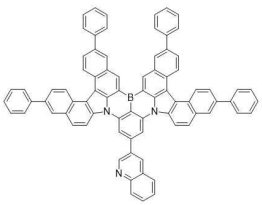
[화학식 1-113]



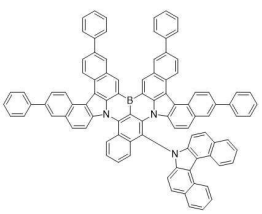
[화학식 1-114]



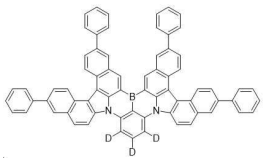
[화학식 1-115]



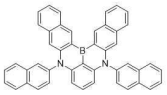
[화학식 1-116]



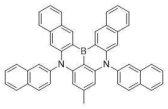
[화학식 1-117]



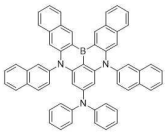
[화학식 1-118]



[화학식 1-119]

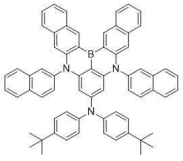


[화학식 1-120]

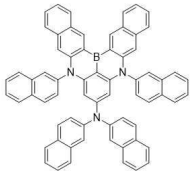


[0035]

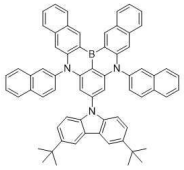
[화학식 1-121]



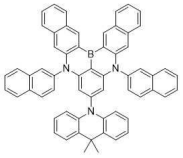
[화학식 1-122]



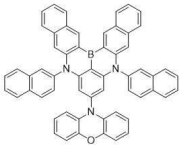
[화학식 1-123]



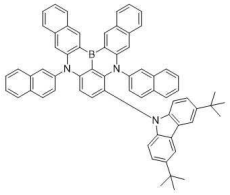
[화학식 1-124]



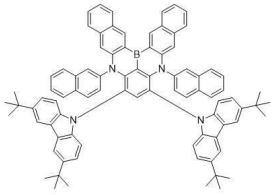
[화학식 1-125]



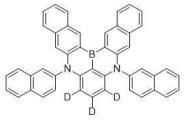
[화학식 1-126]



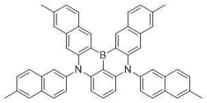
[화학식 1-127]



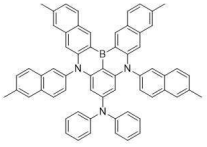
[화학식 1-128]



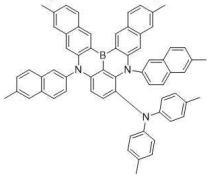
[화학식 1-129]



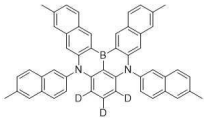
[화학식 1-130]



[화학식 1-131]



[화학식 1-132]



[0036] .

[0037] 일 실시예에 있어서, 상기 보론 화합물은 발광 스펙트럼이 450~600 nm에서 피크를 가질 수 있다.

[0038] 일 실시예에 있어서, 상기 보론 화합물은 발광 스펙트럼의 반치폭이 40 nm 이하일 수 있다.

[0039] 일 실시예에 있어서, 상기 화합물은 광발광양자수율이 0.90 이상일 수 있다.

[0040] 본 발명의 다른 일 측면은, 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 개재된 1층 이상의 유기물층;을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 전술한 화합물을 1종 이상 포함하는, 유기 발광 소자를 제공한다.

[0041] 일 실시예에 있어서, 상기 제1 전극은 애노드이고, 상기 제2 전극은 캐소드이고, 상기 유기물층은, 전술한 화합물을 1종 이상 포함하는 발광층; 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재되고, 정공주입층, 정공수송층 및 전자저지층 중 적어도 하나를 포함한 정공수송영역; 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나를 포함하는 전자수송영역;을 포함할 수 있다.

[0042] 일 실시예에 있어서, 상기 유기 발광 소자는 최대 외부양자효율이 20% 이상일 수 있다.

[0043] 일 실시예에 있어서, 상기 유기물 층은, 1종 이상의 호스트 화합물; 지연 형광 화합물 또는 인광 화합물; 및 전술한 보론 화합물을 1종 이상 포함하는 발광층을 포함할 수 있다.

발명의 효과

[0044] 본 발명의 일 측면에 따르면, 반치폭이 좁아 색순도가 우수한 화합물을 제공할 수 있다.

[0045] 본 발명의 다른 일 측면에 따르면, 전술한 화합물을 포함하는 유기발광 소자를 제공할 수 있다.

[0046] 또한, 본 발명의 다른 일 측면에 따르면, 반치폭이 좁아 색순도가 우수하며 단일항과 삼중항 간의 에너지 차이가 작은 화합물을 이용하여 지연 형광 또는 인광 감광형 초형광 소자를 제공할 수 있다.

[0047] 본 발명의 효과는 상기한 효과로 한정되는 것은 아니며, 본 발명의 상세한 설명, 또는 청구범위에 기재된 발명의 구성으로부터 추론 가능한 모든 효과를 포함하는 것으로 이해되어야 한다.

도면의 간단한 설명

[0048] 도 1은 본 발명의 일 실시예에 의한 보론 화합물의 특성을 나타낸 그래프이다.

도 2는 본 발명의 다른 일 실시예에 의한 보론 화합물의 특성을 나타낸 그래프이다.

도 3은 본 발명의 또 다른 일 실시예에 의한 보론 화합물의 특성을 나타낸 그래프이다.

발명을 실시하기 위한 구체적인 내용

[0049] 이하에서는 첨부한 도면을 참조하여 본 발명을 설명하기로 한다. 그러나 본 발명은 여러 가지 상이한 형태로 구현될 수 있으며, 따라서 여기에서 설명하는 실시예로 한정되는 것은 아니다. 그리고 도면에서 본 발명을 명확하게 설명하기 위해서 설명과 관계없는 부분은 생략하였으며, 명세서 전체를 통하여 유사한 부분에 대해서는 유사한 도면 부호를 붙였다.

[0050] 명세서 전체에서, 어떤 부분이 다른 부분과 "연결"되어 있다고 할 때, 이는 "직접적으로 연결"되어 있는 경우뿐 아니라, 그 중간에 다른 부재를 사이에 두고 "간접적으로 연결"되어 있는 경우도 포함한다. 또한 어떤 부분이 어떤 구성요소를 "포함"한다고 할 때, 이는 특별히 반대되는 기재가 없는 한 다른 구성요소를 제외하는 것이 아니라 다른 구성요소를 더 구비할 수 있다는 것을 의미한다.

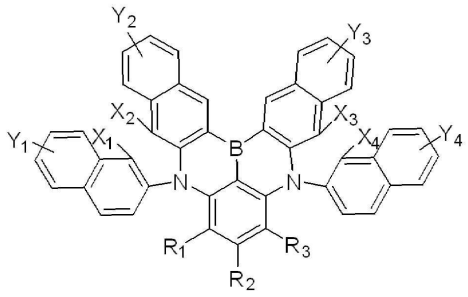
[0051] 본 명세서에서 수치적 값의 범위가 기재되었을 때, 이의 구체적인 범위가 달리 기술되지 않는 한 그 값은 유효숫자에 대한 화학에서의 표준규칙에 따라 제공된 유효 숫자의 정밀도를 갖는다. 예를 들어, 10은 5.0 내지 14.9의 범위를 포함하며, 숫자 10.0은 9.50 내지 10.49의 범위를 포함한다.

[0052] 이하, 첨부된 도면을 참고하여 본 발명의 실시예를 상세히 설명하기로 한다.

[0053] 유기 발광 소자용 보론 화합물

[0054] 본 발명의 일 측면은 하기 화학식 1로 표시되는 보론 화합물을 제공한다.

[0055] [화학식 1]

[0056] 

[0057] 상기 화학식 1에서, Y_1 내지 Y_4는 각각 독립적으로 수소, 중수소, 니트릴기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환, 또는 비치환된 실릴기, 치환, 또는 비치환된 아민기, 치환, 또는 비치환된 아릴기, 치환, 또는 비치환된 헤테로아릴기, 치환, 또는 비치환된 디아릴아미노기, 치환, 또는 비치환된 디헤테로아릴아미노기, 또는 치환, 또는 비치환된 아릴헤테로아릴아미노

기이고, X_1 내지 X_4는 각각 독립적으로 수소이거나, 상호 결합하여 고리를 형성하고, R_1 내지 R_3은 각각 독립적으로, 수소, 중수소, 니트릴기, 할로겐기, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 디아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 디헤테로아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 아릴헤테로아릴아미노기이거나, R_1과 R_2 또는 R_2와 R_3가 상호 결합하여 형성한 고리 구조일 수 있다.

[0058] 상기 X_1 내지 X_4는 각각 수소이거나, X_1와 X_2 또는 X_3와 X_4가 상호 결합하여 고리를 형성할 수 있다.

[0059] 상기 알킬기는 탄소 수 1~10의 직선 또는 분지형 알킬기를 의미할 수 있고, 비치환된 알킬기는 탄소와 수소만으로 구성된 알킬기이고, 치환된 알킬기는 상기 알킬기를 구성하는 탄소 중 적어도 하나가 탄소가 아닌 원자로 치환된 것을 의미한다. 이러한 치환 원자로는 질소, 황, 산소, 규소, 할로겐 원소 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0060] 상기 시클로알킬기는 탄소 수 1~10의 적어도 하나의 고리형 구조를 포함하는 알킬기를 의미할 수 있고, 비치환된 시클로알킬기는 탄소와 수소만으로 구성된 알킬기이고, 치환된 시클로알킬기는 상기 시클로알킬기를 구성하는 탄소 중 적어도 하나가 탄소가 아닌 원자로 치환된 것을 의미한다. 이러한 치환 원자로는 질소, 황, 산소, 규소, 할로겐 원소 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0061] 상기 알콕시기는 탄소 수 1~10의 직선 또는 분지형 알킬기의 말단에 산소가 결합된 것을 의미할 수 있고, 비치환된 알콕시기는 탄소와 수소만으로 구성된 알킬기의 말단에 산소가 결합된 것이고, 치환된 알콕시기는 상기 알콕시기를 구성하는 탄소 중 적어도 하나가 탄소가 아닌 원자로 치환된 것을 의미한다. 이러한 치환 원자로는 질소, 황, 산소, 규소, 할로겐 원소 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0062] 상기 실릴기는 탄소 수 1~10의 직선 또는 분지형 알킬기의 말단에 규소가 결합된 것을 의미할 수 있고, 비치환된 실릴기는 탄소와 수소만으로 구성된 알킬기의 말단에 규소가 결합된 것이고, 치환된 실릴기는 상기 실릴기를 구성하는 탄소 중 적어도 하나가 탄소가 아닌 원자로 치환된 것을 의미한다. 이러한 치환 원자로는 질소, 황, 산소, 규소, 할로겐 원소 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0063] 상기 아민기는 탄소 수 1~10의 직선 또는 분지형 알킬기의 말단에 질소가 결합된 것을 의미할 수 있고, 비치환된 아민기는 탄소와 수소만으로 구성된 알킬기의 말단에 질소가 결합된 것이고, 치환된 아민기는 상기 아민기를 구성하는 탄소 중 적어도 하나가 탄소가 아닌 원자로 치환된 것을 의미한다. 이러한 치환 원자로는 질소, 황, 산소, 규소, 할로겐 원소 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0064] 상기 아릴기는 탄소 수 1~10의 적어도 하나의 방향족 화합물 구조를 포함하는 관능기를 의미할 수 있고, 비치환된 아릴기는 탄소와 수소만으로 구성된 아릴기이고, 치환된 아릴기는 상기 아릴기를 구성하는 탄소 중 적어도 하나의 방향족 화합물 구조를 구성하지 않는 탄소가 다른 원자로 치환된 것을 의미한다. 이러한 치환 원자로는 질소, 황, 산소, 규소, 할로겐 원소 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0065] 상기 헤테로아릴기는 적어도 하나의 탄소가 다른 원자로 치환된 방향족 화합물 구조를 적어도 하나 포함하는 탄소 수 1~10의 관능기를 의미할 수 있고, 비치환된 헤테로아릴기는 치환된 방향족 화합물 구조가 탄소와 수소만으로 연결된 관능기이고, 치환된 헤테로아릴기는 치환된 방향족 화합물 구조가 탄소와 수소 외의 원자를 적어도 하나 포함하는 구조로 연결된 것을 의미한다. 이러한 원자로는 질소, 황, 산소, 규소, 할로겐 원소 등이 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0066] 상기 디아릴아미노기는 두 개의 상기 아릴기가 질소 원자에 결합된 관능기를 의미할 수 있고, 비치환된 디아릴아미노기는 두 개의 상기 아릴기 모두 비치환된 것이고 치환된 디아릴아미노기는 두 개의 상기 아릴기 중 적어도 하나가 치환된 것을 의미한다.

[0067] 상기 디헤테로아릴아미노기는 상기 디아릴아미노기의 아릴기가 모두 헤테로아릴기로 변경된 관능기를 의미할 수 있고, 비치환된 디헤테로아릴아미노기는 두 개의 헤테로아릴기 모두 비치환된 것이고 치환된 디헤테로아릴아미노기는 두 헤테로아릴기 중 적어도 하나가 치환된 것을 의미한다.

[0068] 상기 아릴헤테로아릴아미노기는 상기 디아릴아미노기 중 하나의 아릴기가 헤테로아릴기인 관능기를 의미할 수 있고, 비치환된 아릴헤테로아릴아미노기는 헤테로아릴기와 아릴기 모두 비치환된 것이고 치환된 아릴헤테로아릴아미노기는 아릴기와 헤테로아릴기 중 적어도 하나가 치환된 것을 의미한다.

[0069] 형광 재료는 단일항(singlet)의 에너지만을 사용하여 75%에 해당하는 삼중항(triplet)의 에너지가 손실되므로, 이를 개선하기 위해 단일항에서 삼중항으로 계간전이(Inter-System Crossing, ISC)를 유도하는 인광 재료를 이용한 유기 발광 소자가 시도되었다. 다만, 종래의 인광 재료는 중금속과 유기물 사이의 전하 이동을 통한 발광 방식으로 인해 전계발광(electroluminescence) 스펙트럼이 넓어지는 문제점이 있다.

[0070] 상기 화합물과 같이, 전자가 부족한 보론 원자와 전자가 풍부한 질소 원자를 번갈아 배치하게 되면 HOMO와 LUMO가 분리되는 다중 공명 구조를 형성할 수 있다. 이때 보론과 질소가 단단하게 사이클 구조로 연결되어 발광 상태에서 분자의 구조 변화가 적어 반치폭이 좁은 발광 특성을 구현할 수 있다.

[0071] 단일항의 에너지만을 사용하여 75%에 해당하는 삼중항의 에너지가 손실되는 종래의 형광과 달리, 지연 형광은 단일항과 삼중항 간의 에너지 차이가 작아지도록 분자를 설계하여 상온의 열 에너지만으로도 삼중항에서 단일항으로 역계간전이(Reverse Inter-System Crossing) 현상이 발생하도록 유도함으로써 삼중항과 단일항 전부의 에너지를 활용할 수 있다. 따라서 인광 재료와 같이 중금속 물질 없이도 삼중항을 이용할 수 있어 재료의 효율이 형광 재료에 비해 높고, 삼중항을 경유하여 형광 발광이 구현될 수 있다.

[0072] 종래의 지연 형광 재료는 주개(donor) 단위와 받개(acceptor) 단위를 분리하고, 이들 간의 연결이 고정되지 않아 회전, 진동 등의 분자 운동에 의해 전계발광 스펙트럼이 넓어지는 문제점이 있다.

[0073] 반면, 상기 보론 화합물은 HOMO와 LUMO 간의 겹침이 적은 다중 공명 구조를 포함하므로 지연 형광 특성을 보다 용이하게 구현할 수 있고, 동시에 좁은 반치폭을 형성하여 우수한 색순도를 구현할 수 있다.

[0074] 또한, 상기 보론 화합물과 지연 형광 도펀트, 인광 도펀트 또는 형광 도펀트로 발광층을 구성하게 되면, 단일항의 에너지를 전부 형광 도펀트로 전달할 수 있고, 이에 따라 종래의 형광 도펀트 소자보다 높은 효율과 동시에 형광 도펀트의 고색순도 특성을 함께 구현할 수 있으며, 본 명세서에서는 이를 지연 형광 감광형 또는 인광 감광형 초형광 소자라고 지칭한다.

[0075] 반면, 상기 보론 화합물은 전자가 부족한 원자와 전자가 풍부한 원자가 번갈아 배치된 구조를 통해 HOMO와 LUMO가 분리되는 다중 공명 구조를 포함할 수 있다. 상기 다중 공명 구조는 HOMO와 LUMO 간의 겹침이 적어 상온의 열 에너지로 역계간전이가 용이하여 지연 형광 특성을 구현할 수 있고, 동시에 좁은 반치폭을 형성하여 우수한 색순도를 구현할 수 있다.

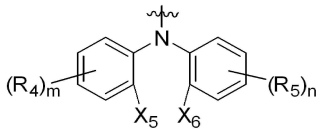
[0076] 예를 들어, 보론 원자는 상대적으로 전자가 부족하여 이에 직접 연결된 벤젠 고리의 탄소는 HOMO가 활성화되고, 질소 원자는 상대적으로 전자가 풍부하여 이에 직접 연결된 벤젠 고리의 탄소는 LUMO가 활성화될 수 있다. 즉, 상기 보론 원자와 연결된 벤젠 고리는 HOMO-LUMO가 반복되는 공명 구조를 가지고, 상기 질소 원자와 연결된 벤젠 고리는 LUMO-HOMO가 반복되는, 상호 배치되는 공명 구조를 가질 수 있다. 상기 화합물은 상호 배치되는 공명 구조를 번갈아 배치하여 반공명 효과(Opposite resonance effect)를 통해 다중 공명 구조를 형성할 수 있다.

[0077] 상기 화합물은 보론-질소의 사이클 구조가 단단하게 고정되어 작은 스토크스 이동(Stoke's shift) 특성을 가지고, 그에 따라 반치폭이 좁은 고색순도를 구현할 수 있다. 또한, 상기 화합물은 HOMO-LUMO를 구현하는 구조를 분리하지 않고, 공명 형태만을 분리하여 발광 효율을 보다 개선할 수 있다.

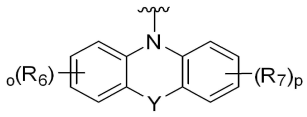
[0078] 상기 보론 화합물은 디벤조카바졸 유래의 구조를 포함할 수 있다. 상기 디벤조카바졸 유래의 구조는 다수의 공명 구조를 포함하여 다중 공명 효과를 최대화할 수 있다.

[0079] 상기 보론 화합물은 R_1 내지 R_3의 치환기 구조를 포함하여 목적하는 물성을 구현할 수 있다. 상기 R_1 내지 R_3 중 적어도 하나는 하기 화학식 2 내지 3 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

[0080] [화학식 2]

[0081] 

[0082] [화학식 3]



[0083]

[0084] 상기 화학식 2 또는 3에서, R_4 내지 R_7은 각각 독립적으로 수소, 중수소, 니트릴기, 할로겐기, 치환 또는 비치환된 방향족 고리, 치환 또는 비치환된 알킬기, 치환 또는 비치환된 시클로알킬기, 치환 또는 비치환된 알콕시기, 치환 또는 비치환된 실릴기, 치환 또는 비치환된 아민기, 치환 또는 비치환된 아릴기, 치환 또는 비치환된 헤테로아릴기, 치환 또는 비치환된 디아릴아미노기, 치환 또는 비치환된 디헤테로아릴아미노기, 또는 치환 또는 비치환된 아릴헤테로아릴아미노기이고, X_5 내지 X_6은 각각 독립적으로 수소이거나, 상호 결합하여 고리를 형성할 수 있고, Y는 황, 산소, 하나 이상의 알킬기 또는 아릴기가 연결된 탄소이고, m, n, o 및 p는 각각 독립적으로 0 내지 4의 정수이다.

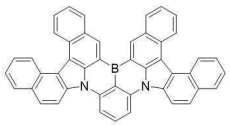
[0085] 상기 화학식 2로 표시되는 화합물은 벤젠 고리 각각에 수소가 결합된 디페닐아민계 화합물 유래의 구조 또는 카바졸계 화합물 유래의 구조일 수 있다.

[0086] 상기 화학식 3으로 표시되는 화합물은 아크리딘계 화합물, 페노티아진계 화합물 또는 페녹사진계 화합물 유래의 구조일 수 있다.

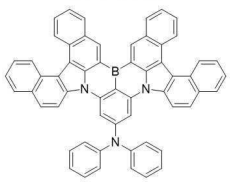
[0087] 상기 화학식 2 및 3의 구조는 상기 화학식 1의 벤젠 고리에 직접 연결되는 질소 원자를 포함하여 일종의 전자 받개와 유사한 특성을 가질 수 있다. 상기 치환기 구조는 LUMO 구조를 보다 안정화시켜 상기 화합물의 발광 스펙트럼을 이동시킬 수 있다.

[0088] 상기 화합물은 하기 화학식 1-1~1-132 중 어느 하나로 표시될 수 있다.

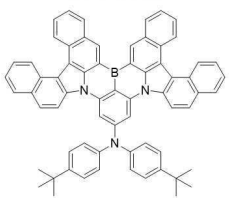
[화학식 1-1]



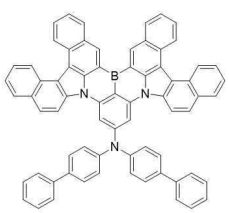
[화학식 1-2]



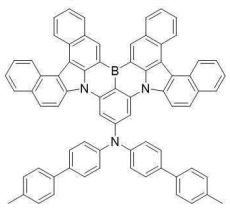
[화학식 1-3]



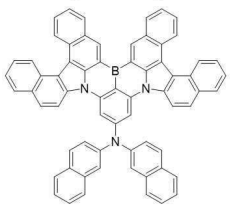
[화학식 1-4]



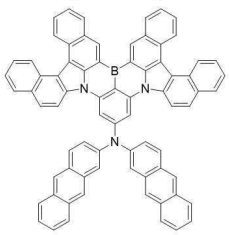
[화학식 1-5]



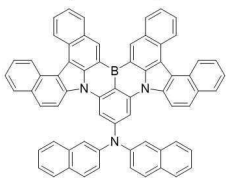
[화학식 1-6]



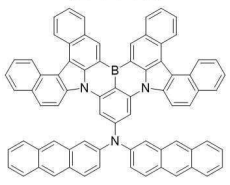
[화학식 1-7]



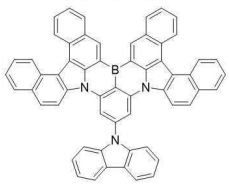
[화학식 1-8]



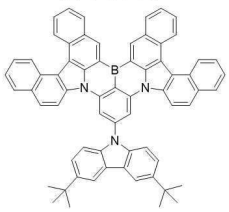
[화학식 1-9]



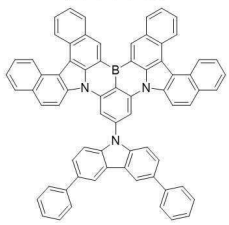
[화학식 1-10]



[화학식 1-11]

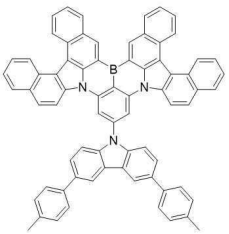


[화학식 1-12]

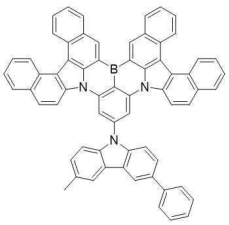


[0089]

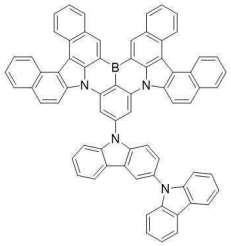
[화학식 1-13]



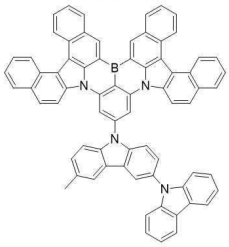
[화학식 1-14]



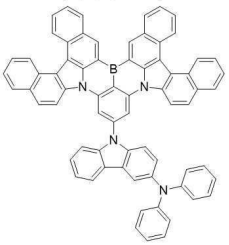
[화학식 1-15]



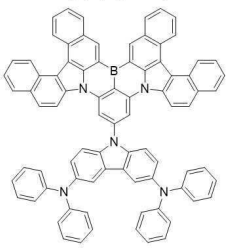
[화학식 1-16]



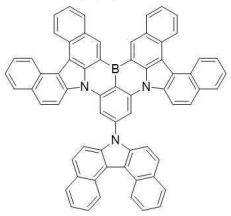
[화학식 1-17]



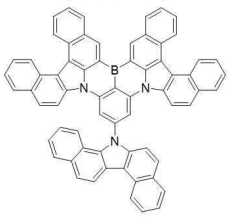
[화학식 1-18]



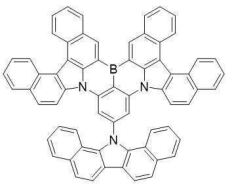
[화학식 1-19]



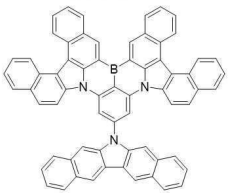
[화학식 1-20]



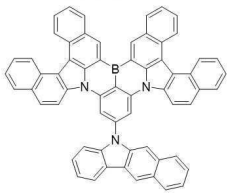
[화학식 1-21]



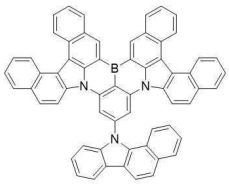
[화학식 1-22]



[화학식 1-23]

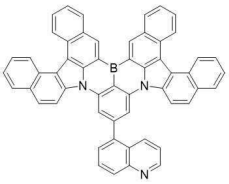


[화학식 1-24]

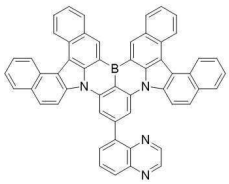


[0090]

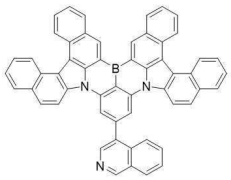
[화학식 1-25]



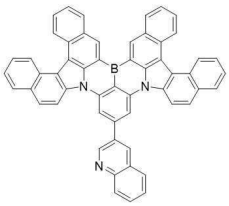
[화학식 1-26]



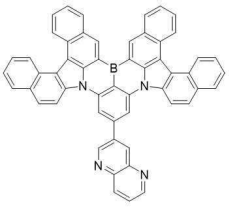
[화학식 1-27]



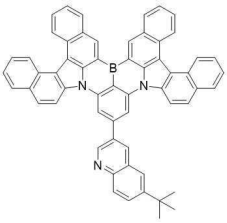
[화학식 1-28]



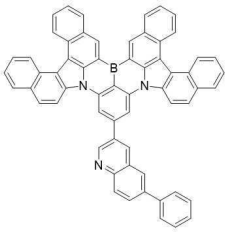
[화학식 1-29]



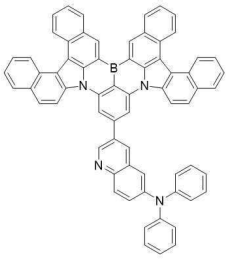
[화학식 1-30]



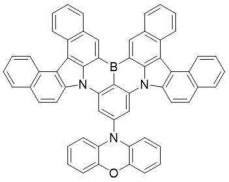
[화학식 1-31]



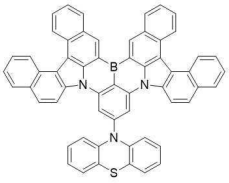
[화학식 1-32]



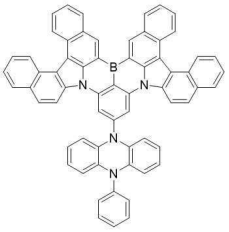
[화학식 1-33]



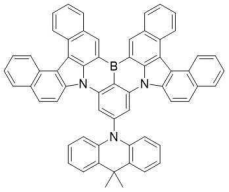
[화학식 1-34]



[화학식 1-35]

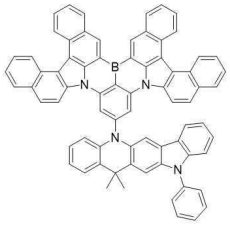


[화학식 1-36]

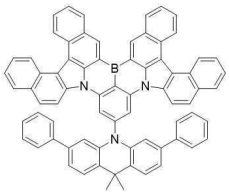


[0091]

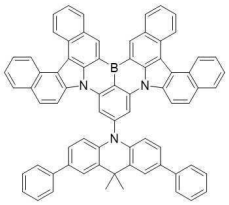
[화학식 1-37]



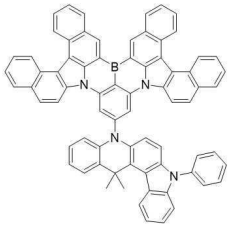
[화학식 1-38]



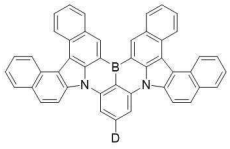
[화학식 1-39]



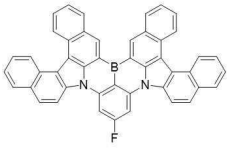
[화학식 1-40]



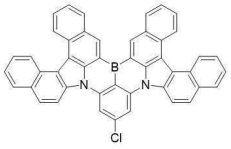
[화학식 1-41]



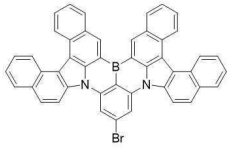
[화학식 1-42]



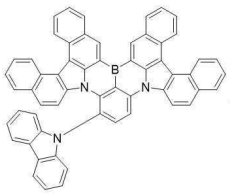
[화학식 1-43]



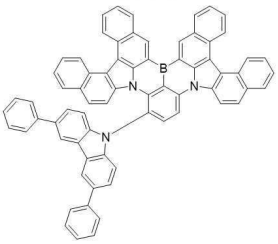
[화학식 1-44]



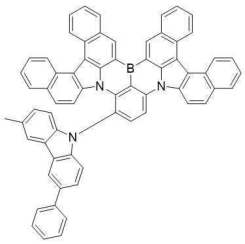
[화학식 1-45]



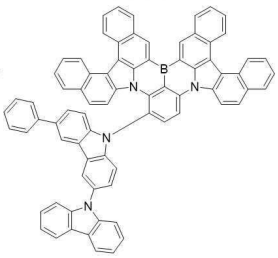
[화학식 1-46]



[화학식 1-47]

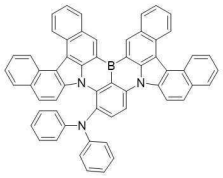


[화학식 1-48]

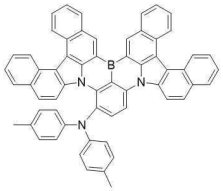


[0092]

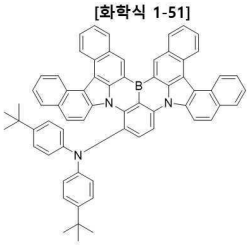
[화학식 1-49]



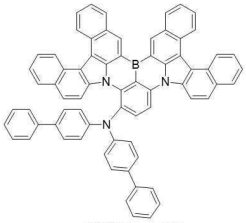
[화학식 1-50]



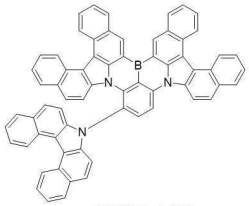
[화학식 1-51]



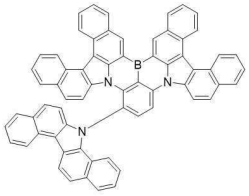
[화학식 1-52]



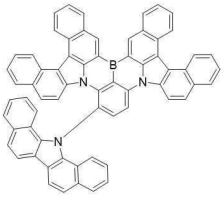
[화학식 1-53]



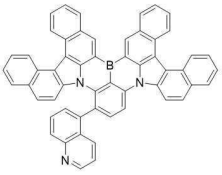
[화학식 1-54]



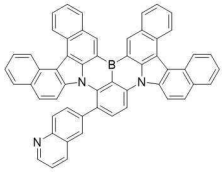
[화학식 1-55]



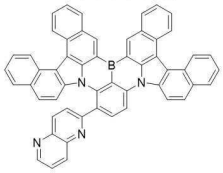
[화학식 1-56]



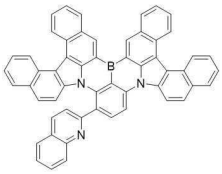
[화학식 1-57]



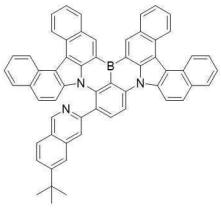
[화학식 1-58]



[화학식 1-59]

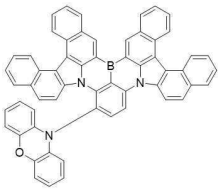


[화학식 1-60]

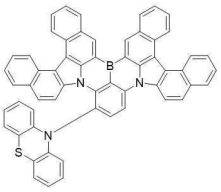


[0093]

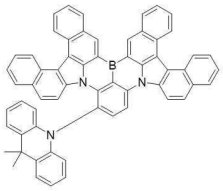
[화학식 1-61]



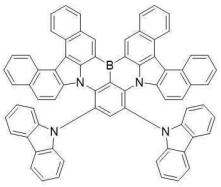
[화학식 1-62]



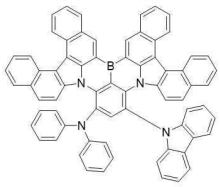
[화학식 1-63]



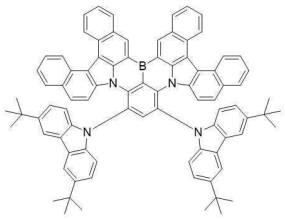
[화학식 1-64]



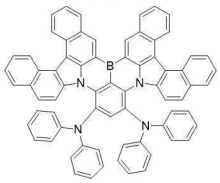
[화학식 1-65]



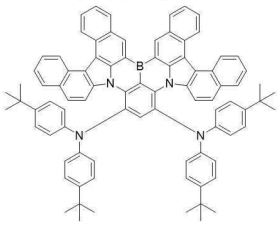
[화학식 1-66]



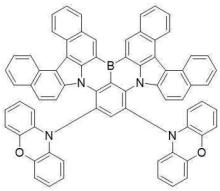
[화학식 1-67]



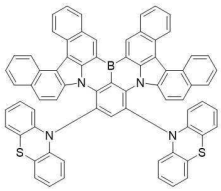
[화학식 1-68]



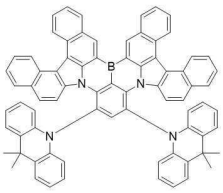
[화학식 1-69]



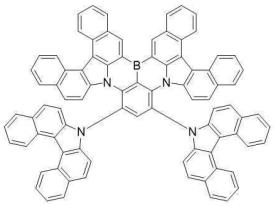
[화학식 1-70]



[화학식 1-71]

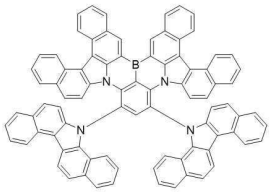


[화학식 1-72]

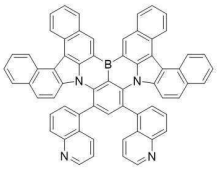


[0094]

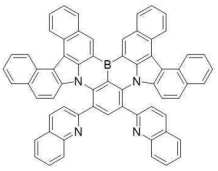
[화학식 1-73]



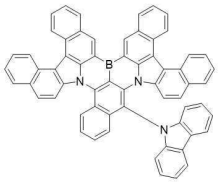
[화학식 1-74]



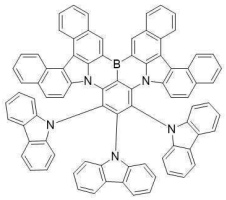
[화학식 1-75]



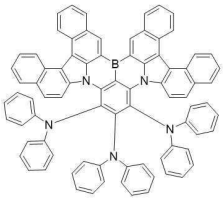
[화학식 1-76]



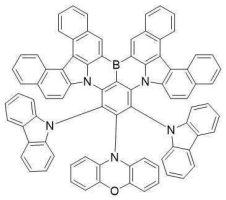
[화학식 1-77]



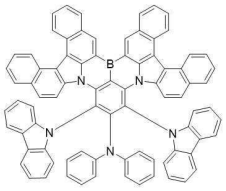
[화학식 1-78]



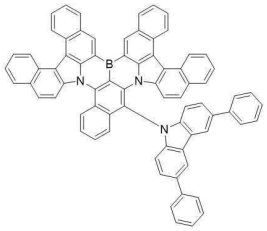
[화학식 1-79]



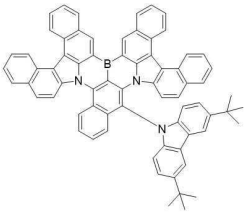
[화학식 1-80]



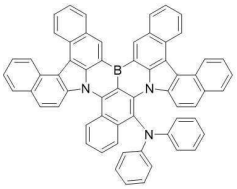
[화학식 1-81]



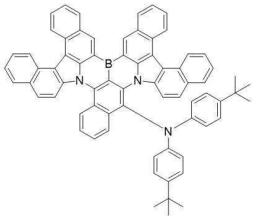
[화학식 1-82]



[화학식 1-83]

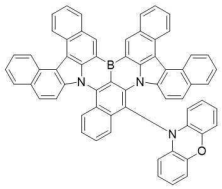


[화학식 1-84]

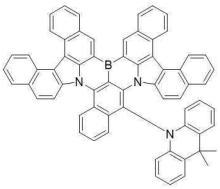


[0095]

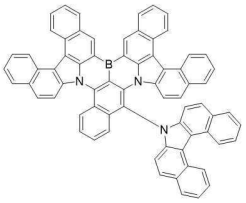
[화학식 1-85]



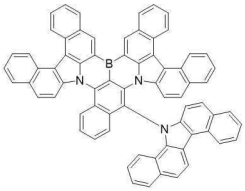
[화학식 1-86]



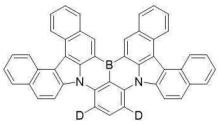
[화학식 1-87]



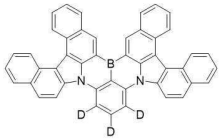
[화학식 1-88]



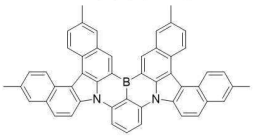
[화학식 1-89]



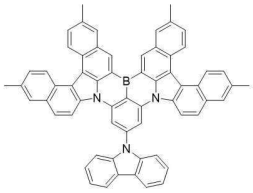
[화학식 1-90]



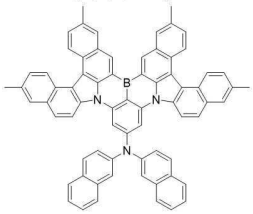
[화학식 1-91]



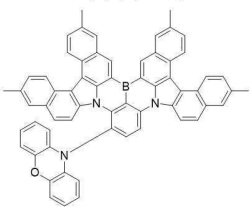
[화학식 1-92]



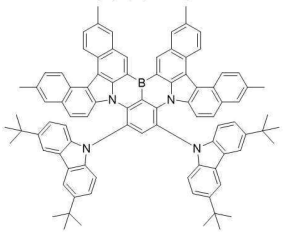
[화학식 1-93]



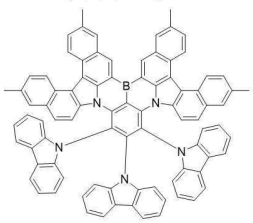
[화학식 1-94]



[화학식 1-95]

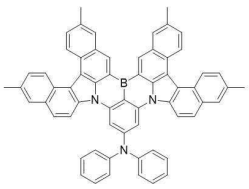


[화학식 1-96]

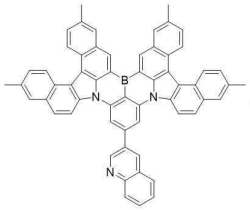


[0096]

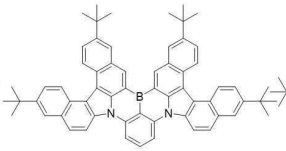
[화학식 1-97]



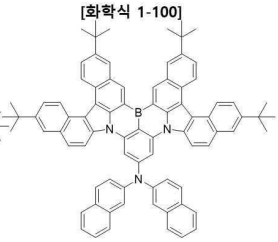
[화학식 1-98]



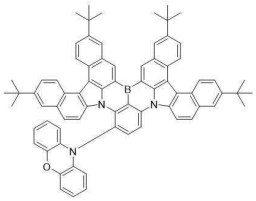
[화학식 1-99]



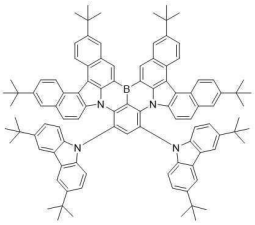
[화학식 1-100]



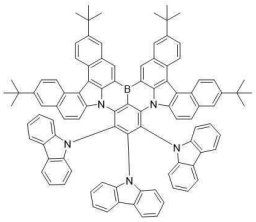
[화학식 1-101]



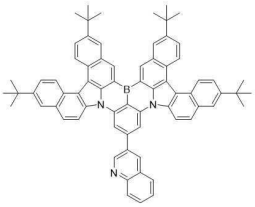
[화학식 1-102]



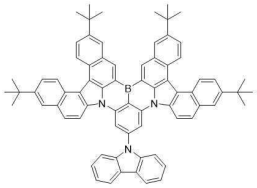
[화학식 1-103]



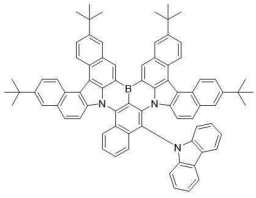
[화학식 1-104]



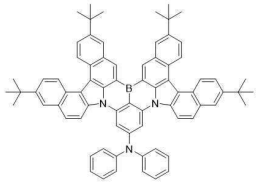
[화학식 1-105]



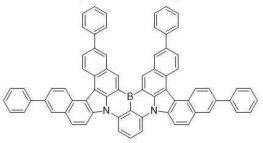
[화학식 1-106]



[화학식 1-107]

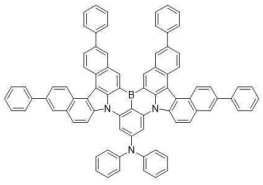


[화학식 1-108]

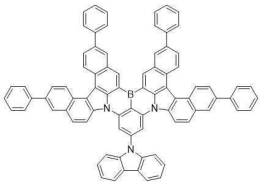


[0097]

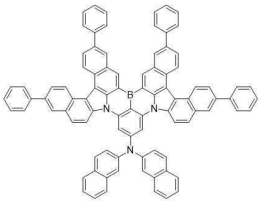
[화학식 1-109]



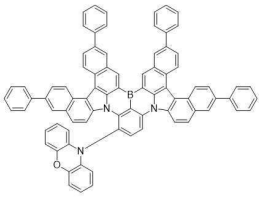
[화학식 1-110]



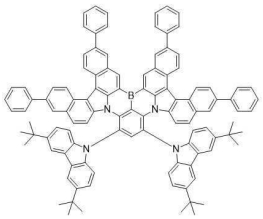
[화학식 1-111]



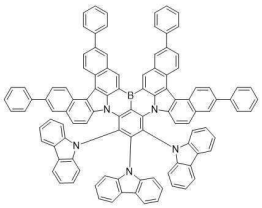
[화학식 1-112]



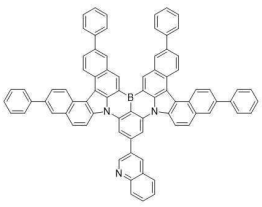
[화학식 1-113]



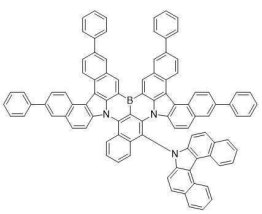
[화학식 1-114]



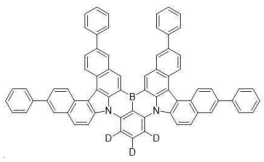
[화학식 1-115]



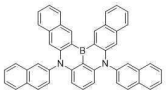
[화학식 1-116]



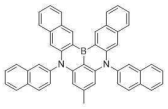
[화학식 1-117]



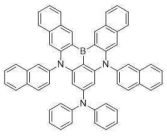
[화학식 1-118]



[화학식 1-119]

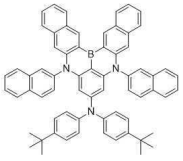


[화학식 1-120]

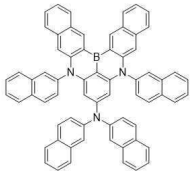


[0098]

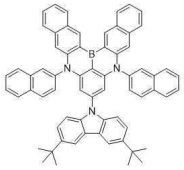
[화학식 1-121]



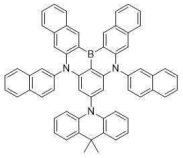
[화학식 1-122]



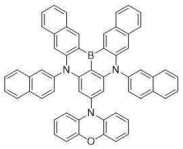
[화학식 1-123]



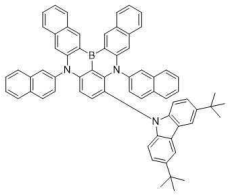
[화학식 1-124]



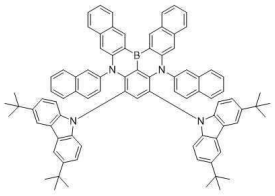
[화학식 1-125]



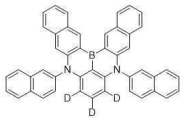
[화학식 1-126]



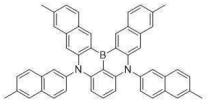
[화학식 1-127]



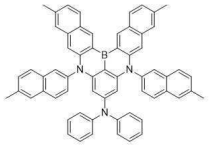
[화학식 1-128]



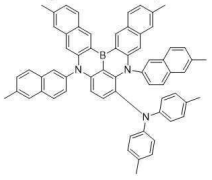
[화학식 1-129]



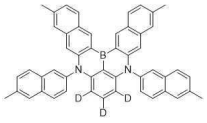
[화학식 1-130]



[화학식 1-131]



[화학식 1-132]



[0099]

[0100] 상기 화합물은 발광 스펙트럼이 450~600 nm에서 피크를 가질 수 있고, 예를 들어, 450 nm, 460 nm, 470 nm, 480 nm, 490 nm, 500 nm, 510 nm, 520 nm, 530 nm, 540 nm, 550 nm, 560 nm, 570 nm, 580 nm, 590 nm, 600 nm, 또는 이들 중에서 선택된 두 값의 사잇값을 가질 수 있다. 일 예로, 상기 화합물은 490~570 nm 내외의 녹색광을 발할 수 있다.

[0101] 상기 화합물은 반치폭이 40 nm 이하, 예를 들어40 nm, 35 nm, 30 nm, 25 nm, 20 nm, 15 nm, 10 nm, 5 nm, 또는 이들 중에서 선택된 두 값의 사잇값일 수 있다. 상기 반치폭은 작을수록 우수한 색순도를 구현할 수 있다.

[0102] 상기 화합물은 단일항과 삼중항 간의 에너지 차이(ΔE_{st})가 0.20 eV 이하, 예를 들어, 0.20 eV, 0.15 eV, 0.10 eV, 0.05 eV, 또는 이들 중에서 선택된 두 값의 사잇값일 수 있다. 상기 에너지 차이가 작을수록 단일항과 삼중항 간의 역계간전이가 용이해져 지연 형광 재료로서 활용도가 우수할 수 있다.

[0103] 상기 화합물은 광발광양자수율(photoluminescence quantum yield; PLQY)이 0.90 이상, 예를 들어, 0.90 이상, 0.925 이상, 0.95 이상, 또는 0.975 이상일 수 있다. 상기 PLQY 값이 클수록 유기 발광 소자의 효율성이 향상될 수 있다.

[0104] 이러한 특성 값은 전술한 상기 화합물의 구조적 특성으로부터 기인할 수 있다.

[0106] 유기 발광 소자

[0107] 본 발명의 다른 일 측면에 따른 유기 발광 소자는, 제1 전극; 상기 제1 전극과 대향하여 구비된 제2 전극; 및 상기 제1 전극과 상기 제2 전극 사이에 개재된 1층 이상의 유기물층;을 포함하고, 상기 유기물층 중 1층 이상은 전술한 화합물을 1종 이상 포함할 수 있다.

[0108] 상기 유기 발광 소자는 전술한 화합물을 포함하는 유기물층을 구비함으로써 좁은 반치폭, 고효율을 구현할 수 있다. 또한, 상기 보론 화합물이 지연 형광 특성을 나타내면, 상기 소자는 지연 형광 유기 발광 소자일 수 있다.

[0109] 일 예시에서, 상기 유기물층은, 1종 이상의 호스트 화합물; 지연 형광 화합물 또는 인광 화합물; 및 전술한 보론 화합물을 포함하는 발광층을 포함할 수 있다. 유기 발광 소자의 특성은 발광층의 호스트(host) 및 도펀트(dopant) 재료 구성에 좌우될 수 있으며, 지연 형광 도펀트 또는 인광 도펀트를 호스트로 적용하게 되면100%의 단일항 에너지를 형광 도펀트로 전달할 수 있다. 따라서 발광층에 호스트, 지연 형광 또는 인광 호스트, 형광 도펀트로 구성하게 되면, 종래의 형광 도펀트 소자보다 높은 효율과 동시에 형광 도펀트의 고색순도 특성을 함께 구현하는 지연 형광 감광형 또는 인광 감광형 초형광 소자일 수 있다.

[0110] 상기 호스트 화합물, 지연 형광 화합물 및 인광 화합물로는 공지의 다양한 화합물을 사용할 수 있고, 이러한 지연 형광 또는 인광 특성을 가지는 소자에 전술한 보론 화합물을 포함하여 그 특성을 현저히 개선할 수 있다. 예를 들어, 상기 지연 형광 화합물 또는 인광 화합물은 하늘색 내지 녹색을 구현하는 도펀트일 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0111] 상기 지연 형광 화합물 또는 인광 화합물의 함량은 상기 호스트 화합물 100 중량부를 기준으로 0.1 내지 50중량부, 예를 들어, 0.1중량부, 5중량부, 10중량부, 15중량부, 20중량부, 25중량부, 30중량부, 35중량부, 40중량부, 45중량부, 50중량부 또는 이들 중 두 가지 값의 사잇값일 수 있다.

[0112] 상기 보론 화합물의 함량은 상기 지연 형광 화합물 또는 상기 인광 화합물 함량 100중량부를 기준으로 0.1 내지 50중량부, 예를 들어, 0.1중량부, 5중량부, 10중량부, 15중량부, 20중량부, 25중량부, 30중량부, 35중량부, 40중량부, 45중량부, 50중량부 또는 이들 중 두 가지 값의 사잇값일 수 있다. 상기 지연 형광 또는 인광 도펀트 대비 소량의 보론 화합물을 첨가하여 그 특성을 개선할 수 있다.

[0113] 다른 일 예시에서, 상기 유기 발광 소자는, 공지의 다양한 녹색 발광층용 호스트와 상기 화합물을 포함할 수 있다.

[0114] 상기 제1 전극은 애노드이고, 상기 제2 전극은 캐소드이고, 상기 유기물층은, 전술한 화합물을 1종 이상 포함하는 발광층; 상기 제1전극과 상기 발광층 사이에 개재되고, 정공주입층, 정공수송층 및 전자저지층 중 적어도 하나를 포함한 정공수송영역; 및 상기 발광층과 상기 제2전극 사이에 개재되고, 정공저지층, 전자수송층 및 전자주입층 중 적어도 하나를 포함하는 전자수송영역;을 포함할 수 있다.

[0115] 상기 제1전극 하부 또는 제2전극 상부에는 기판이 추가로 배치될 수 있다. 상기 기판으로는, 일반적인 유기 발광 소자에서 사용되는 기판을 사용할 수 있고, 기계적 강도, 열안정성, 투명성, 표면 평활성, 취급용이성 및 방수성이 우수한 유리 기판 또는 투명 플라스틱 기판을 사용할 수 있다.

[0116] 상기 제1전극은 반사형 전극, 반투과형 전극 또는 투과형 전극일 수 있다. 상기 제1전극은 예를 들어, 기판 상부에, 제1전극용 물질을 증착법 또는 스퍼터링법 등으로 형성될 수 있다. 상기 제1전극용 물질은 정공 주입이 용이하도록 높은 일함수를 갖는 물질 중에서 선택될 수 있으며, 이러한 제1전극용 물질의 예시로는 산화인듐주석(ITO), 산화인듐아연(IZO), 산화주석(SnO_2), 산화아연(ZnO), 마그네슘(Mg), 알루미늄(Al), 알루미늄-리튬(Al-Li), 칼슘(Ca), 마그네슘-인듐(Mg-In), 마그네슘-은(Mg-Ag) 등을 이용할 수 있다.

[0117] 상기 정공주입층은 상기 제1전극 상부에 진공증착법, 스핀코팅법, 캐스트법, LB법 등과 같은 다양한 방법을 이용하여 형성될 수 있다. 진공증착법에 의하여 정공주입층을 형성하는 경우, 그 증착 조건은 정공주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적으로 하는 정공 주입층의 구조 및 열적 특성 등에 따라 다르나, 예를 들면, 증착온도 약 100 내지 약500℃, 진공도 약 10^{-8} 내지 약 10^{-3} torr, 증착 속도 약 0.01 내지 약 100 Å/sec의 범위에서 선택될

수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[0118] 스핀코팅법에 의하여 정공주입층을 형성하는 경우, 코팅 조건은 정공주입층 재료로 사용하는 화합물, 목적하는 하는 정공주입층의 구조 및 열적 특성에 따라 상이하지만, 약 2,000 rpm 내지 약 5,000 rpm의 코팅 속도, 코팅 후 용매 제거를 위한 열처리 온도는 약 80℃ 내지 200℃의 온도 범위에서 선택될 수 있으나 이에 한정되는 것은 아니다.

[0119] 상기 정공수송층 및 전자저지층 형성 조건은 정공주입층 형성 조건을 참조할 수 있다.

[0120] 상기 각 층의 두께는 약 100Å 내지 약 10,000 Å, 예를 들면, 약 100 Å 내지 약 1,000 Å일 수 있다.

[0121] 상기 발광층이 호스트 및 도펀트를 포함할 경우, 도펀트의 함량은 통상적으로 호스트 약 100 중량부를 기준으로 약 0.01 내지 약 15 중량부의 범위에서 선택될 수 있으나, 이에 한정되는 것은 아니다.

[0122] 상기 유기 발광 소자의 최대 외부양자효율(EQE)은 20% 이상, 예를 들어, 20% 이상, 21% 이상, 22% 이상, 23% 이상, 24% 이상, 25% 이상, 26% 이상, 27% 이상, 28% 이상, 29% 이상, 또는 30% 이상일 수 있다. 최대 외부양자효율이 10% 내외인 종래의 발광 소자와 달리, 상기 유기 발광 소자는 상기 화합물을 포함하여 우수한 외부양자효율을 구현할 수 있다.

[0123] 이하, 본 발명의 실시예에 관하여 더욱 상세히 설명하기로 한다. 다만, 이하의 실험 결과는 상기 실시예 중 대표적인 실험 결과만을 기재한 것이며, 실시예 등에 의해 본 발명의 범위와 내용이 축소되거나 제한되어 해석될 수 없다. 아래에서 명시적으로 제시하지 않은 본 발명의 여러 구현예의 각각의 효과는 해당 부분에서 구체적으로 기재하도록 한다.

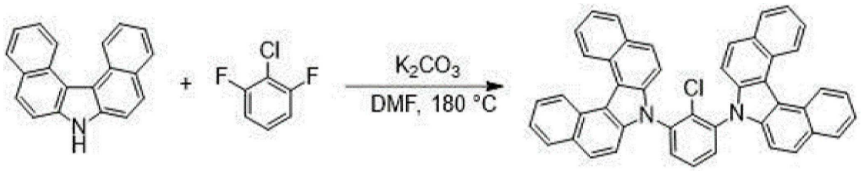
[0124] 실시예 1: 화합물 1의 합성

[0125] 1) 중간체 1-1의 합성

[0126] 7H-디벤조[c,g]카바졸(1.0 g, 3.74 mmol)과 탄산칼륨(K_2CO_3, 1.2 g, 9.00 mmol)을 디메틸포름아미드(DMF, 10 mL)에 용해시킨 후 2-클로로-1,3-디플루오로벤젠(222 mg, 1.50 mmol)을 투입하고 180℃에서 교반하였다. 24시간 후 상온으로 냉각시키고, 물과 디클로로메탄(MC)으로 추출하였다. 유기층을 무수 황산마그네슘으로 건조, 여과 및 농축시킨 후 디클로로메탄과 메탄올로 재결정화하여 중간체 1-1(820 mg, 85%)을 수득하였다.

[0127] 상기 중간체 1-1의 합성 과정을 아래 반응식 1에 간략하게 정리하였다.

[0128] [반응식 1]



중간체 1-1

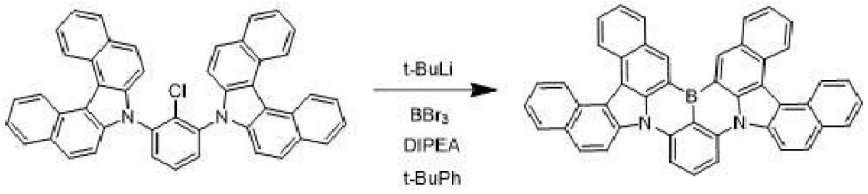
[0129]

[0130] 2) 화합물 1의 합성

[0131] -40℃에서 상기 중간체 1-1(1.5 g, 1.17 mmol)의 삼차-부틸벤젠(20 mL) 용액에 삼차-부틸리튬(1.6M, 1.5 mL, 2.33 mmol)을 천천히 첨가하였다. 상온에서 20분간 교반한 후 60℃에서 2시간 동안 더 교반하였다. -40℃로 냉각시키고 보론트리브로마이드(BBr_3, 0.42 mL, 2.33 mmol)를 천천히 첨가하고 상온에서 30분간 교반하였다. 0℃에서 N,N-디이소프로필에틸아민(1.16 mL, 3.58 mmol)을 천천히 첨가하고 상온에서 20분간 교반한 후 120℃에서 밤새 교반하였다. 반응 혼합물을 상온으로 냉각시키고, 디클로로메탄으로 희석한 후 마그네슘실리케이트로 여과 및 농축시켰다. 잔류물을 칼럼으로 정제하여 화합물 1 (0.2 g, 15%)을 수득하였다.

[0132] 상기 화합물 1의 합성 과정을 아래 반응식 2에 간략하게 정리하였다.

[0133] [반응식 2]



화합물 1

[0134]

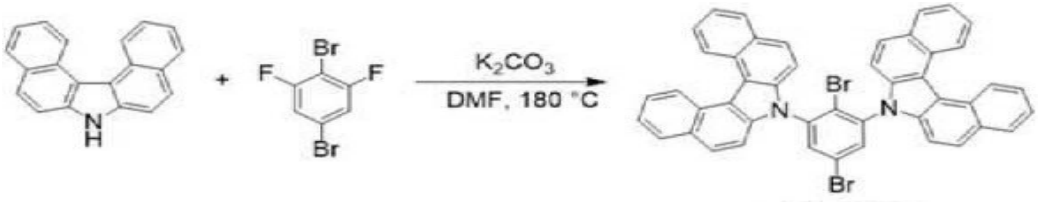
[0135] 실시예 2: 화합물 3의 합성

[0136] 1) 중간체 2-1의 합성

[0137] 7H-디벤조[c,g]카바졸(1.0 g, 3.74 mmol)과 탄산칼륨(K_2CO_3, 1.2 g, 9.00 mmol)을 디메틸포름아미드(DMF, 10 mL)에 용해시킨 후 2,5-디브로모-1,3-디플루오로벤젠(408 mg, 1.50 mmol)을 투입하고 180℃에서 교반하였다. 24시간 후 상온으로 냉각시키고, 물과 메틸렌클로라이드(MC)로 추출하였다. 유기층을 무수황산마그네슘으로 건조, 여과 및 농축시킨 후 디클로로메탄과 메탄올로 재결정화하여 중간체 2-1(920 mg, 80%)을 수득하였다.

[0138] 상기 중간체 2-1의 합성 과정을 아래 반응식 3에 간략하게 정리하였다.

[0139] [반응식 3]



중간체 2-1

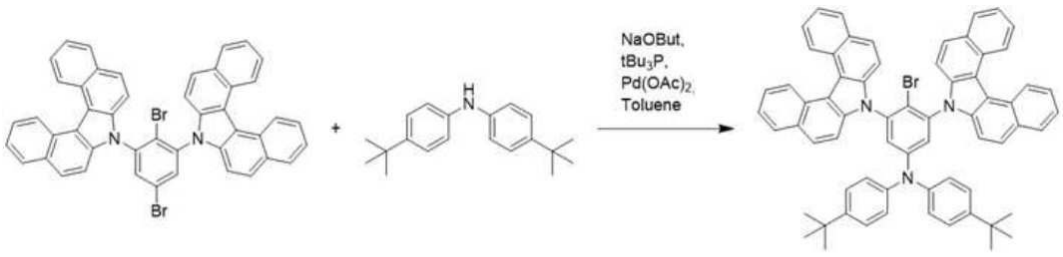
[0140]

[0141] 2) 중간체 2-2의 합성

[0142] 중간체 2-1(1.0 g, 1.30 mmol), 비스(4-(삼차부틸)페닐)아민(370 mg, 1.30 mmol)와 삼차부톡시 나트륨(250 mg, 2.61 mmol)의 톨루엔 (15 mL) 혼합물을 아르곤으로 치환하였다. $Pd(OAc)_2$ (29 mg, 0.13 mmol)과 트리부틸포스핀(50% 톨루엔 용액, 0.12 mL, 0.26 mmol)을 투입하고 110도에서 20시간 동안 교반하였다. 상온으로 식히고 디클로로메탄으로 희석하여 실리카겔/셀라이트로 여과, 농축하였다. 잔류물을 칼럼크로마토그래피로 정제하여 중간체 2-2(460 mg, 36%)를 얻었다.

[0143] 상기 중간체 2-2의 합성 과정을 아래 반응식 4에 간략하게 정리하였다.

[0144] [반응식 4]



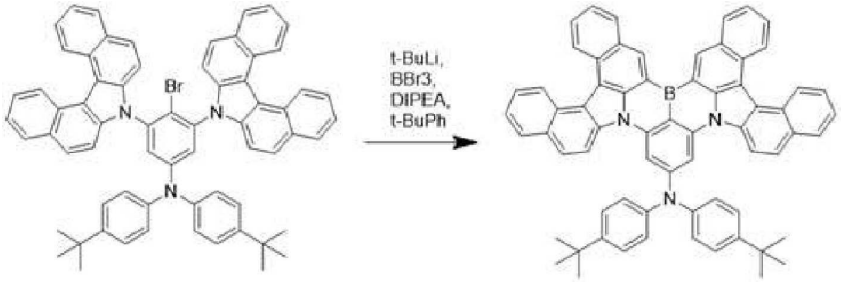
중간체 2-2

[0145]

[0146] 3) 화합물 3의 합성

[0147] 중간체 1-1 대신 중간체 2-2를 사용하고, 상기 실시예 1의 화합물 1의 합성법과 유사한 방법을 사용하여 화합물 3을 합성하였고, 합성 과정을 아래 반응식 5에 간략하게 정리하였다.

[0148] [반응식 5]



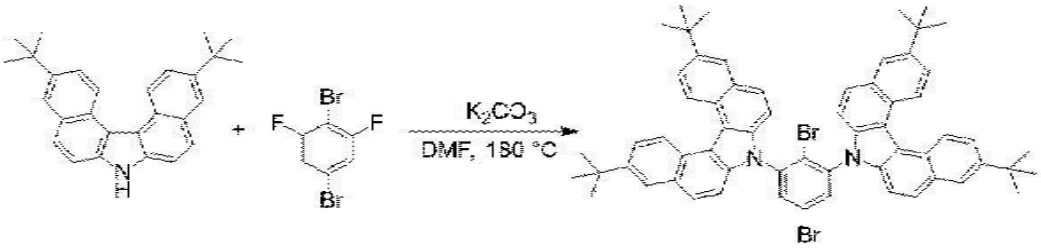
화합물 3

[0149]

[0150] 실시예 3: 화합물 105의 합성

[0151] 7H-디벤조[c,g]카바졸 대신 3,11-디-삼차부틸-7H-디벤조[c,g]카바졸을 사용하고 상기 화합물 3의 합성법과 유사한 방법을 사용하여 중간체 3-1을 합성하였고, 합성 과정을 아래 반응식 6에 간략하게 정리하였다.

[0152] [반응식 6]

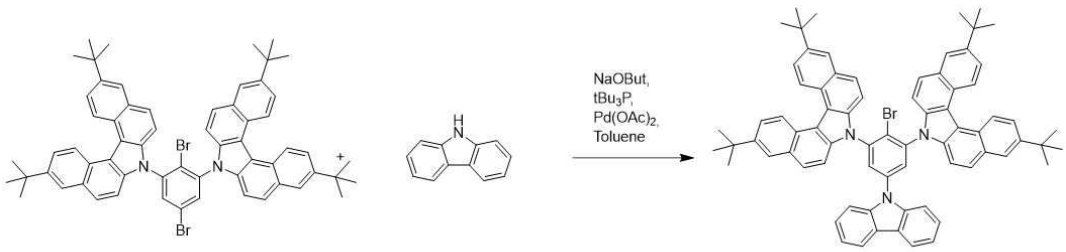


중간체 3-1

[0153]

[0154] 중간체 2-1 대신 중간체 3-1을 사용하고 상기 화합물 3의 합성법과 유사한 방법을 사용하여 중간체 3-2를 합성하였고, 합성 과정을 아래 반응식7에 간략하게 정리하였다.

[0155] [반응식 7]

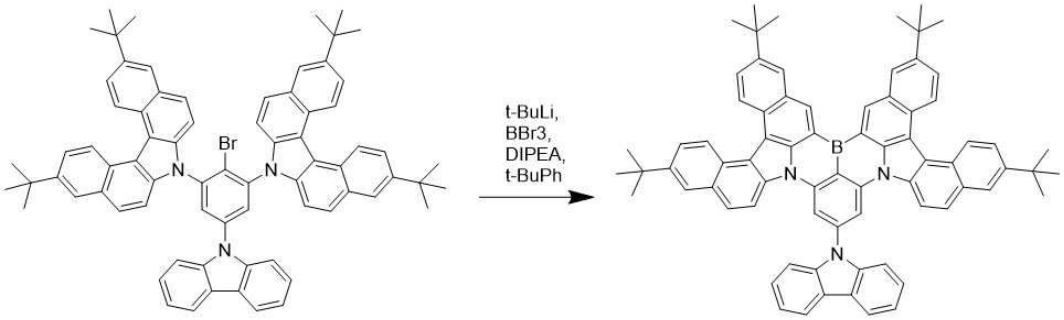


중간체 3-2

[0156]

[0157] 중간체 1-1 대신 중간체 3-2를 사용하고 상기 화합물 1의 합성법과 유사한 방법을 사용하여 화합물 105를 합성하였고, 합성 과정을 아래 반응식 8에 간략하게 정리하였다.

[0158] [반응식 8]

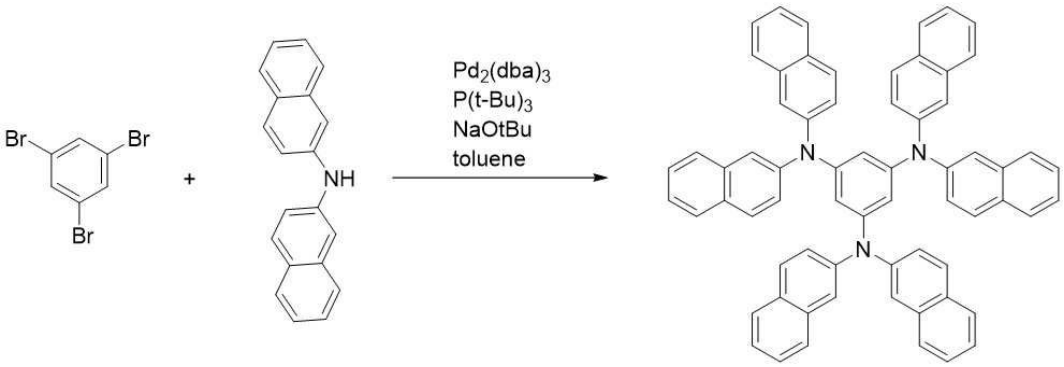


화합물 105

[0159]

[0160] 실시예 4: 화합물 122의 합성

[0161] [반응식 9]

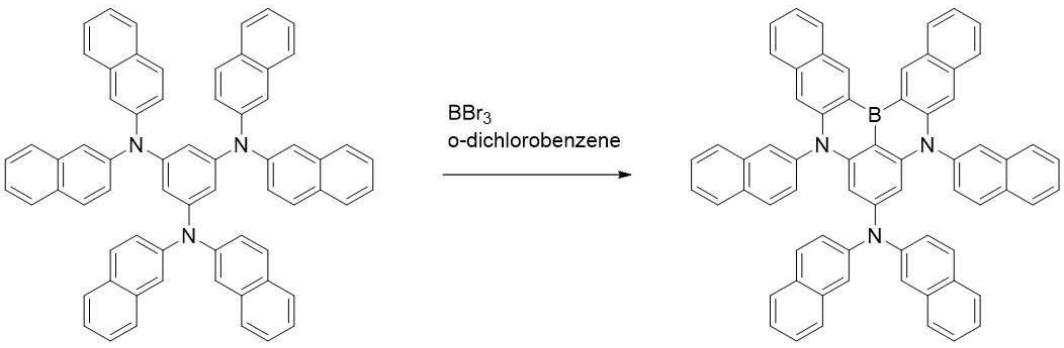


중간체 4

[0162]

[0163] 1,3,5-트리브로모벤젠(1 g, 3.18 mmol), 디(나프탈렌-2-일)아민(2.74 g, 10.17 mmol), $P(t\text{-}Bu)_3$(0.8 ml, 3.17 mmol), 및 $NaOBu^t$(1.84 g, 19.15 mmol)의 무수 톨루엔(60 mL) 혼합물을 아르곤 가스로 치환하고 $Pd_2(dba)_3$(0.26 g, 0.28 mmol)을 투입한 뒤 18시간 동안 160℃ 온도로 교반하였다. 반응이 종료되면 화합물을 여과하고 디클로로메탄과 헥산을 이용해 세척, 농축한 후 디클로로메탄과 헥산으로 재결정화하여 중간체 4(2.6 g, 93%)를 수득하였다.

[0164] [반응식 10]



화합물 122

[0165]

[0166] 중간체 4(1 g, 1.14 mmol)의 o-다이클로로벤젠(15 ml) 혼합물을 아르곤으로 치환시킨 후, BBr_3 (0.31 ml, 2,5 mmol)을 상온에서 천천히 적가하였다. 10분 후 반응물을 20시간 동안 200℃에서 환류시켰다. 반응이 종료되면

톨루엔을 이용하여 반응물을 희석하고, 실리카 패드로 여과, 농축하였다. 잔류물을 헥산과 디클로로메탄으로 컬럼크로마토그래피를 이용해 정제하여 화합물 122(0.2 g, 20%)를 수득하였다.

[0167] 실험예

[0168] 상기 실시예 1 내지 4에 따라 제조한 화합물 1, 화합물 3과 화합물 122에 대한 물성 평가를 진행하였다. 측정된 물성은 UV-Vis 흡수 스펙트럼과 상온 광발광 스펙트럼으로, UV-Vis 흡수 스펙트럼은 JASCO V-750을 이용하여 톨루엔 용매에 $10x^{-4}$M의 농도로 희석하여 측정하였다. 상온 광발광 스펙트럼의 경우 동일한 조건으로 JASCO-FP 8500 장비를 이용해 측정하였다. 절대 광발광양자수율(PLQY) 값은 PBICT(12,12'-(6-phenyl-1,3,5-triazine-2,4-diyl)bis(11-phenyl-11,12-dihydroindolo[2,3-a]carbazole))에 1중량% 도핑하여 박막을 제작한 뒤 JASCO-FP 8500 장비에 내장된 적분구를 활용하여 측정하였다. TRPL(Time-Resolved Photoluminescence)은 Hamamatsu C11367 장비를 이용하여 톨루엔 용매에 $10x^{-4}$M의 농도로 희석하여 측정하였다. 측정 결과를 표 1과 도 1, 도 2 및 도 3에 나타내었다.

표 1

[0169]

구분	비교예 1	실시예 1	실시예 2	실시예 4
화합물	C545T	화합물 1	화합물 3	화합물 122
최대 흡수 스펙트럼	473 nm	501 nm	490 nm	500 nm
최대 발광 스펙트럼	506 nm	529 nm	515 nm	522 nm
스토크스 이동	33 nm	28 nm	25 nm	22 nm
반치폭	74 nm	37 nm	34 nm	27 nm
단일항-삼중항 에너지	1.03 eV	0.16 eV	0.15 eV	0.26 eV
PLQY	0.92	0.90	0.95	0.93
삼중항 엑시톤 수명	-	0.13 μs	0.11 μs	0.07 μs

[0170] ITO 유기 기판을 50mm x 50mm x 0.7mm 크기로 절단하고 아세톤, 이소프로필 알코올과 증류수를 이용하여 각 10분 동안 세정한 후, 10분 동안 자외선을 조사하고 오존에 노출시켜 세정한 후 진공증착장치에 상기 ITO 유리기판을 장착하였다.

[0171] 상기 ITO 유리 기판에 HATCN (7 nm) / NPB (53 nm) / TCTA (20 nm) / PBICT (호스트) 및 화합물 1, 또는 3 (도펀트) 1중량 % (20 nm) / TmPyPB (40 nm) / LiF (1.5 nm) / Al (100 nm) 순으로 적층하여 유기발광소자를 제작하였다. 소자 측정 결과를 표 2에 나타내었다.

표 2

[0172]

구분	비교예 1	실시예 1	실시예 2
화합물	C454T	화합물 1	화합물 3
최대 EQE (%)	3.6	4.9	12.7
반치폭 (nm)	76	57	34
최대 전기 발광 파장 (nm)	506	535	521
CIE 좌표	(0.26, 0.60)	(0.30, 0.59)	(0.19, 0.72)

[0173] 상기 ITO 유리 기판에 HATCN (7 nm) / NPB (53 nm) / TCTA (20 nm) / PBICT (호스트) 및 4CzIPN (지연형광 호스트) 30중량 % 및 화합물 1, 또는 3 (도펀트) 1중량 % (20 nm) / TmPyPB (40 nm) / LiF (1.5 nm) / Al (100 nm) 순으로 적층하여 지연형광 감광형 유기발광소자를 제작하였다. 소자 측정 결과를 표 3에 나타내었다.

표 3

[0174]

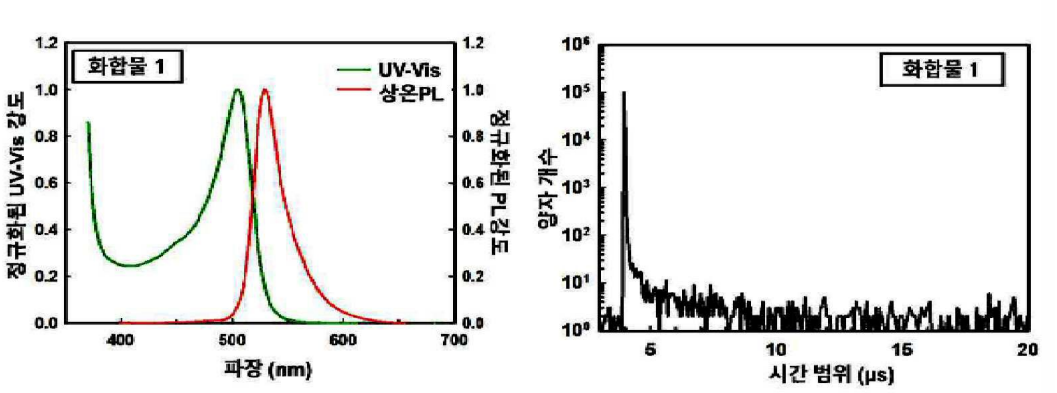
구분	비교예 1	실시예 1	실시예 2
화합물	C454T	화합물 1	화합물 3
최대 EQE (%)	3.6	16.1	22.8
반치폭 (nm)	76	59	36
최대 전기 발광 파장 (nm)	506	537	523
CIE 좌표	(0.26, 0.60)	(0.34, 0.61)	(0.21, 0.75)

[0175] 전술한 본 발명의 설명은 예시를 위한 것이며, 본 발명이 속하는 기술분야의 통상의 지식을 가진 자는 본 발명의 기술적 사상이나 필수적인 특징을 변경하지 않고서 다른 구체적인 형태로 쉽게 변형이 가능하다는 것을 이해할 수 있을 것이다. 그러므로 이상에서 기술한 실시예들은 모든 면에서 예시적인 것이며 한정적이 아닌 것으로 이해해야만 한다. 예를 들어, 단일형으로 설명되어 있는 각 구성 요소는 분산되어 실시될 수도 있으며, 마찬가지로 분산된 것으로 설명되어 있는 구성 요소들도 결합된 형태로 실시될 수 있다.

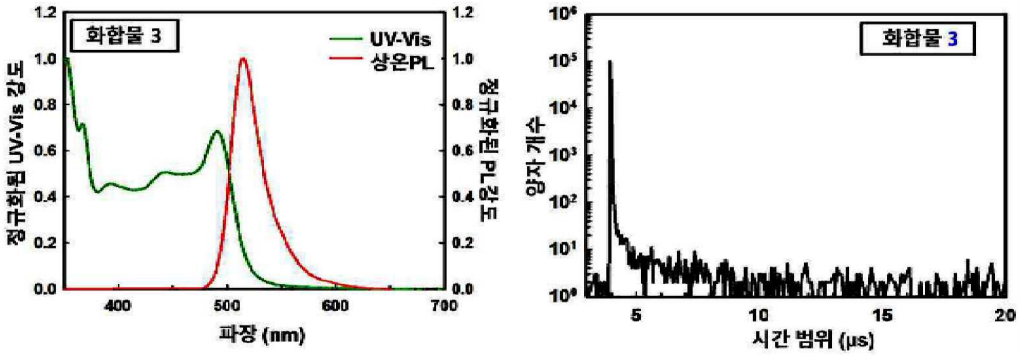
[0176] 본 발명의 범위는 후술하는 청구범위에 의하여 나타내어지며, 청구범위의 의미 및 범위 그리고 그 균등 개념으로부터 도출되는 모든 변경, 또는 변형된 형태가 본 발명의 범위에 포함되는 것으로 해석되어야 한다.

도면

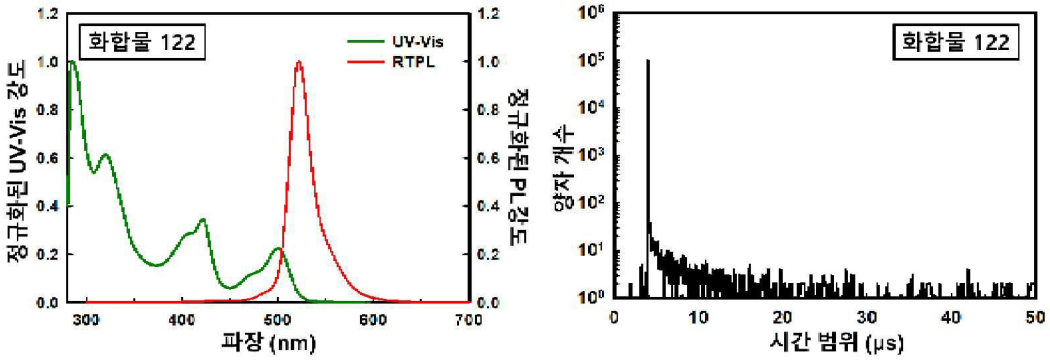
도면1



도면2



도면3


화합물 122
UV-Vis
RTPL
정규화된 UV-Vis 강도
정규화된 PL 강도
파장 (nm)
화합물 122
양자 개수
시간 범위 (μs)